


POLUIÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS: SELEÇÃO
DE UM MODELO MATEMÁTICO DE
DISPERSÃO BIDIMENSIONAL

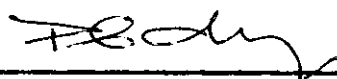
João Alfredo Küpper

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS
DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO
RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.).

Aprovada por:



Prof. Pedro Guerrero Salazar



Prof. Paulo Canedo de Magalhães



Prof. Giulio Massarani

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

NOVEMBRO DE 1982

KÜPPER, JOÃO ALFREDO

Poluição de Águas Subterrâneas: Seleção de um Modelo Matemático de Dispersão Bidimensional (Rio de Janeiro) 1982.

IX, 193p. 29,7 cm (COPPE-UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 1982)

Tese - Univ. Fed. Rio de Janeiro, COPPE-UFRJ, Programa de Engenharia Civil.

1. Dispersão Bidimensional I. COPPE/UFRJ
II. Título (série).

Para Angela

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Pedro Guerrero Salazar, pela orientação e apoio no desenvolvimento do trabalho.

Ao Prof. Sergio F. Roldão, pelas valiosas sugestões.

A Lilian Vicentini, pela datilografia.

Ao CNPq e à CNEN que, sob a forma de concessão de bolsa e auxílio para pesquisa, propiciaram condições para a execução deste trabalho.

E a todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

A poluição de águas subterrâneas pode ser modelada por um conjunto de equações que envolve duas equações de continuidade, uma para a mistura água e poluente (equação de fluxo) e outra para o poluente (equação de transporte de massa ou de dispersão), além da equação de Darcy e de equações de estado para a mistura.

Devido a condições de contorno complexas, não é possível, na maioria dos casos práticos, obter soluções analíticas para esse conjunto de equações, sendo necessário recorrer-se a métodos numéricos.

A solução numérica da equação de fluxo praticamente não apresenta problemas, ao contrário do que se sucede com a equação de transporte de massa, que apresenta oscilações e amortecimento.

Neste estudo foram analisados e comparados vários métodos propostos para se eliminar esses problemas que surgem na resolução numérica da equação de transporte de massa. As comparações foram feitas para casos simplificados (uni e bidimensional) onde se conhecem soluções analíticas.

Essas comparações, permitiram, na sequência dos estudos, selecionar um modelo de simulação para o transporte de poluentes em águas subterrâneas, sendo apresentados os seus fundamentos teóricos. O desempenho desse modelo foi verificado também para situações simplificadas onde se conhecem soluções analíticas.

ABSTRACT

An approach to the groundwater pollution may be done by a set of equations which includes two continuity equations, one for the mixture water and pollutant (flow equation) and other only for the pollutant (mass-transport equation), Darcy's equation and state equations for the mixture.

Complex boundary conditions in practical cases may lead to the use of numerical methods to solve this set of equations, because analytical solutions are not available.

However, some difficulties appear when numerical methods are applied to the mass transport equation: the numerical solution presents overshoot and numerical dispersion.

In this work, several methods developed for eliminating this type of problems were analysed and compared. The comparisons were made for simplified cases (uni and bidimensional) for which there are known analytical solutions.

In the sequence of the works, it was possible to select a simulation model for the pollutant transport in groundwater, whose theoretical background and numerical methods are presented. The model's performance was verified for two simple cases.

ÍNDICE

I	-	INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
		I.1 Definição do Problema	1
		I.2 Modelamento Matemático	4
		I.3 Objetivos	7
II	-	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	9
		II.1 Conceito de Dispersão	9
		II.2 O Esquema de Dispersão	12
		II.3 Resumo das Hipóteses Assumidas para Aplica- ção do Esquema de Dispersão à Poluição de Águas Subterrâneas	17
		II.4 Equação de Fluxo	18
		II.5 Equação de Transporte de Massa	20
		II.6 Solução Analítica para a Equação de Trans- porte de Massa Unidimensional	25
		II.7 Solução Analítica para a Equação de Trans- porte de Massa Bidimensional Simplificada	27
III	-	ANÁLISE NUMÉRICA PARA A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA	32
		III.1 Metodologia de Diferenças Finitas	33
		III.2 Aplicação da Metodologia de Diferenças Finitas à Equação de Transporte de Massa	37
		III.2.1 Descrição dos Problemas	37
		III.2.2 Métodos Propostos para Eliminação dos Problemas	39

III.3	Comparação Entre os Métodos Numéricos	
	Propostos - Caso Unidimensional	43
III.3.1	Critérios de Comparação	44
III.3.2	Caso Unidimensional Analisado	46
III.3.3	Análise de Sensibilidade para os Parâmetros ΔT e ΔX	48
III.3.4	Análise de Sensibilidade para o Parâmetro Br	58
III.4	Comparação entre os Métodos Numéricos	
	Propostos - Caso Bidimensional	68
III.4.1	Caso Bidimensional Analisado	69
III.4.2	O Desempenho do Método de Laumbach	72
III.4.3	Comparação para $Br_{\ell} = 100$	74
III.4.4	Comparação para $Br_{\ell} = 1000$	81
III.4.5	Comparação para $Br_{\ell} = 10000$	84
IV	- APRESENTAÇÃO DE UM MODELO MATEMÁTICO BIDIMENSIONAL PARA ANÁLISE DA POLUIÇÃO EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	119
IV.1	Introdução	119
IV.2	Métodos Numéricos	121
IV.2.1	Discretização da Equação de Fluxo	121
IV.2.2	Discretização da Equação de Transporte de Massa	123
IV.2.3	Critérios de Estabilidade	130
IV.2.4	Condições Iniciais e de Contorno	132
IV.2.5	Balanco de Massas	134

IV.3	Descrição do Programa de Computador	136
IV.3.1	Organização Geral	136
IV.3.2	Descrição das Subrotinas	139
IV.4	Verificação Unidimensional para o Modelo de Konikow-Bredehoeft	144
IV.5	Verificação Bidimensional para o Modelo de Konikow-Bredehoeft	149
V	- CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	158
	BIBLIOGRAFIA	161
	APÊNDICE A - EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS FINITAS OBTIDAS PARA A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA UNIDIMENSIONAL	167
	APÊNDICE B - EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS FINITAS OBTIDAS PARA A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA BIDIMENSIONAL SIMPLIFICADA	173
	APÊNDICE C - DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFERENÇAS FINITAS PARA O TERMO DISPERSIVO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA	181
	APÊNDICE D - DADOS PARA OPERAÇÃO DO MODELO	185

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

I.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Devido ao aumento da demanda, a importância da água subterrânea, como fonte de suprimento, tem se tornado cada vez maior no contexto da utilização dos recursos hídricos.

As águas subterrâneas ocorrem em formações geológicas que, quando tem grande capacidade de armazenamento e facilidade de transmissão da água, são denominadas aquíferos.

Em geral, as águas subterrâneas são de boa qualidade, pois os aquíferos são reservatórios naturais relativamente bem protegidos: as camadas superiores de solo atuam como verdadeiros filtros para as águas que percolam para o aquífero; além disso, o próprio aquífero possui capacidade de reter impurezas.

O desenvolvimento, entretanto, traz uma acentuada produção de rejeitos que, aliados a constantes alterações do meio ambiente, acabam por suplantam a capacidade de depuração dos solos, poluindo as águas subterrâneas.

A poluição caracteriza-se pela modificação das propriedades físicas, químicas e/ou biológicas da água. Ela está relacionada

cionada a situações em que a qualidade da água deteriora-se a níveis perigosos para o consumidor, restringindo severamente a sua utilização.

Deve-se notar, entretanto, que a ocorrência de agentes poluidores não implica, necessariamente, que o aquífero esteja poluído. Mesmo sob condições não perturbadas, sem interferência do homem, a água subterrânea contém uma certa quantidade de materiais dissolvidos, que pode atingir níveis insatisfatórios para determinados usos.

A poluição da água subterrânea é muitas vezes, um processo praticamente irreversível. Devido à baixa velocidade da água, à capacidade de adsorção e de absorção do meio poroso e ao pequeno tamanho dos canalículos da estrutura porosa, é muito difícil, senão impossível, restabelecer o seu estado original não poluído. Os fenômenos de adsorção e troca iônica são especialmente importantes quando materiais finos, como argilas, estão presentes no aquífero, sob a forma de lentes, pois as espécies adsorvidas continuam a realimentar a poluição da água subterrânea por períodos prolongados.

Os tipos de poluição de água subterrânea podem ser divididos em quatro grupos (Fried, 1975; Bear, 1979):

1. *Ambiental* - devido à interação água-meio poroso. Pode-se citar como exemplos a dissolução de rochas calcáreas, a intrusão de águas salinas em aquíferos costeiros ou a intrusão de águas de baixa qualidade

de aquíferos adjacentes, devido à quebra de equilíbrio entre dois aquíferos.

2. *Agrícola* - devido às águas de irrigação ou de chuva que dissolvem e carreiam, para o aquífero, fertilizantes, sais, herbicidas, pesticidas e minerais.
3. *Doméstico* - devido a quebras acidentais de tubulações de esgoto, infiltração de fossas sépticas e recargas artificiais, aos aquíferos, de efluentes de tratamentos parciais (contaminantes biológicos: batérias e vírus).
4. *Industrial* - devido a efluentes de processos industriais que contenham compostos químicos em solução ou suspensão, infiltração de águas de chuva através de depósitos de rejeitos ou acidentes, como quebra de tubulações. A poluição radioativa também pode se processar desta maneira, tendo como origem barragens de rejeitos de efluentes de processos nucleares, ou acidentes em depósitos superficiais ou subterrâneos de materiais ou de lixos radioativos.

Como a poluição das águas subterrâneas é um processo praticamente irreversível, com graves consequências físicas e econômicas, o melhor procedimento de combate à poluição ainda é o preventivo. Nos casos onde isto não é possível, pois o aquífero já se encontra poluído, deve-se tentar minimizar seus efeitos negativos, através de sistemas de controle que removam ou

impeçam o espalhamento dos poluentes. Nesse sentido, é importante dispor-se de técnicas adequadas (modelos matemáticos) que permitam prever a movimentação dos poluentes ao longo do aquífero, estimando-se as variações temporais e espaciais de concentração dos poluentes, bem como o tempo de residência dos mesmos no interior do aquífero.

I.2 MODELAMENTO MATEMÁTICO

O movimento dos agentes de poluição pode ser descrito pela teoria de escoamento de fluidos miscíveis. Trata-se de transporte de massa em meios porosos, onde a massa considerada é a de algum soluto (=poluente), movendo-se com algum solvente (=água) nos vazios do meio poroso, seja ele saturado ou não. Os mecanismos de transporte de massa incluem: convecção, difusão molecular, dispersão mecânica, interação sólido-soluto (adsorção), reações químicas e fenômenos de decaimento radioativo. Esses três últimos mecanismos podem ser associados a fontes ou sorvedouros de soluto.

A dispersão mecânica é o principal responsável pelo espalhamento dos poluentes no aquífero. Ela depende da magnitude e da distribuição de velocidades no meio poroso, bem como da geometria da estrutura porosa. Para a análise da dispersão são empregadas duas escalas: uma, microscópica, onde se levam em consideração os fenômenos que se desenvolvem no interior dos poros; e outra, macroscópica, onde se considera o meio poroso como um meio contínuo, assumindo, para a dispersão, um modelo

de comportamento semelhante ao da difusão (a vazão em massa é proporcional ao gradiente de concentração).

As equações que se obtêm para descrever os fenômenos de transporte de massa em meios porosos são complexas, tornando muito difícil a obtenção de soluções analíticas, que só são possíveis em alguns poucos casos, onde se consideram hipóteses bem simplificadas. E, em geral, os problemas de poluição de águas subterrâneas não se enquadram nesses casos simples. A complexidade real das condições iniciais e de contorno exige que se recorra a métodos numéricos para solucionar a equação de transporte de massa. Para tanto, pode se utilizar métodos de diferenças finitas ou métodos de elementos finitos. Em termos de concepção teórica, os métodos de diferenças finitas são mais simples e mais fáceis de serem implementados e operados. Deparam-se, porém, com um problema: em geral os contornos da área de interesse não são bem representados.

Por outro lado, os métodos de elementos finitos são mais sofisticados, apresentando maiores recursos para resolver numericamente uma equação diferencial, principalmente no que se refere à representação das condições de contorno: os elementos finitos podem se ajustar a qualquer forma de contorno, além de não estarem restritos a um tamanho fixo, ao longo do domínio.

Apesar de os métodos de elementos finitos apresentarem essas potencialidades, eles deparam-se com os mesmos problemas que surgem na aplicação dos métodos de diferenças finitas à equação de transporte de massa, oscilação e amortecimento da so-

lução numérica (Van Genuchten, 1976), que não estão ainda completamente resolvidos.

Devido a esses problemas e ao fato de que a delimitação exata das fronteiras do aquífero não é fator preponderante na análise de fenômenos que se processam no seu interior, os métodos de diferenças finitas mostram-se mais interessantes, devido à sua simplicidade, para tratar os problemas de poluição de águas subterrâneas.

De uma maneira geral, um método numérico, para ser eficiente, deve ter como principais características: 1) facilidade de aplicação; 2) acurácia das soluções; 3) rapidez de execução (tempo de processamento). A verificação destas características, em geral, é feita para situações simplificadas, onde se conhecem soluções analíticas, permitindo comparar e avaliar os resultados. Esse procedimento admite que, se um método numérico fornece bons resultados para situações particulares, ele deve apresentar um comportamento semelhante, quando aplicado a situações mais complexas (reais). Verificações mais rigorosas do desempenho de métodos numéricos devem incluir comparações com resultados experimentais, de laboratório ou de campo, cuidadosamente obtidos.

I.3 OBJETIVOS

Os objetivos deste trabalho podem ser assim enumerados:

1. Conceituar dispersão mecânica e difusão molecular em meios porosos e estabelecer as equações necessárias ao modelamento matemático da poluição em águas subterrâneas (caso dispersivo).
2. Apresentar e discutir os problemas encontrados na aplicação da metodologia de diferenças finitas à equação de transporte de massa (ou equação de dispersão), bem como apresentar os métodos numéricos desenvolvidos para se eliminar esses problemas.
3. Verificar, através de comparações com soluções analíticas conhecidas (unidimensionais e bidimensionais), qual o desempenho de cada um dos métodos com relação a diferentes situações de transporte de massa (convectivo ou dispersivo) e de discretizações espaciais e temporais.
4. Selecionar um modelo matemático que simule adequadamente o transporte de poluentes em águas subterrâneas.

O Capítulo II trata dos fundamentos teóricos básicos, apresentando a conceituação de dispersão e difusão em meios porosos, as equações que compõem o "esquema de dispersão", e as

soluções analíticas, correspondentes a um caso unidimensional e a um bidimensional simplificado, para a equação de transporte de massa.

No Capítulo III apresentam-se os problemas encontrados na aplicação da metodologia de diferenças finitas à equação de transporte de massa e os diferentes métodos desenvolvidos para se eliminar ou atenuar esses problemas. Procede-se, então, a uma comparação, para os casos unidimensionais e bidimensionais, para esses métodos numéricos, tomando por base soluções analíticas conhecidas.

Finalmente, no Capítulo IV descreve-se um modelo matemático selecionado para simular a poluição em águas subterrâneas, apresentando-se as verificações efetuadas para dois casos simples (um unidimensional e outro bidimensional) onde se conhecem as soluções analíticas.

CAPÍTULO II

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

II.1 CONCEITO DE DISPERSÃO

Os fenômenos de dispersão e difusão em meios porosos podem ser visualizados através da injeção instantânea de uma certa quantidade de soluto no interior de um meio poroso, por onde já escoar um fluido (fig. II.1). Nessa situação observa-se que enquanto o centro de massa da nuvem de soluto se desloca com a mesma velocidade do fluido, há um aumento progressivo do tamanho da nuvem. Esse espalhamento, com consequente diminuição na concentração do soluto, é devido aos fenômenos de difusão e dispersão.

A difusão é um processo físico de transferência de massa que depende das propriedades cinéticas das moléculas de fluido. A difusão tenta reestabelecer o equilíbrio de concentração entre fluidos com concentrações diferentes, que estão em contato direto, fazendo com que moléculas de zonas de alta concentração migrem para zonas de baixa concentração. Esse processo, dependente do tempo, é diretamente proporcional ao gradiente de concentração (Lei de Fick).

A dispersão, por outro lado, é um processo de mistura-mento mecânico, causado pelo escoamento tortuoso de fluido ao

longo das interconexões geometricamente complexas do meio poroso. Dentro de uma escala microscópica, onde se levam em conta os fenômenos que se processam no interior dos pequenos canalículos, três são as causas que dão origem à dispersão (Fried, 1975): primeiro, como o fluxo nos canalículos é laminar, há um acentuado gradiente transversal de velocidade que faz com que partículas próximas ao centro desses canalículos viajem mais depressa do que aquelas próximas à parede (fig.II.2a); segundo, canalículos de maior diâmetro oferecem menor resistência ao fluxo, fazendo com que partículas de fluido viajem mais depressa (fig.II.2.b); e terceiro, a velocidade do fluido dentro dos canalículos nem sempre é paralela à velocidade média do fluxo (velocidade de Darcy), originando, então, um espalhamento das partículas de fluido devido às diferentes trajetórias percorridas por elas (fig.II.2c).

A dispersão traz, como resultado, variações de concentração muito semelhantes às aquelas criadas pela difusão. Deve-se ressaltar, entretanto, que a dispersão é função de gradientes de velocidade e não de gradientes de concentração, como a difusão.

No sistema de poros, dispersão e difusão ocorrem simultaneamente, sendo que a difusão tenta re-equilibrar as variações de concentração originadas pela dispersão. Ao mesmo tempo em que o soluto se espalha ao longo dos tubos de corrente, cria-se um gradiente de concentração entre tubos de corrente adjacentes, provocando um fluxo de massa lateral entre eles, devido à difusão molecular (fig.II.3).

A análise matemática da dispersão e da difusão molecular, incluindo o fluido e o meio poroso, é muito difícil, devido à complexidade da estrutura dos poros, sendo praticamente impossível descrever-se as condições de contorno para o fluido. A alternativa é usar um modelo macroscópico que considere os resultados médios dos fenômenos de transporte de massa ao longo do meio poroso. Nessa escala macroscópica, o espalhamento de soluto devido à dispersão mecânica e à difusão é denominado dispersão hidrodinâmica (Bear, 1979).

Para a análise macroscópica assumem-se as seguintes hipóteses:

- 1) o fluxo médio no interior do meio poroso é definido pela Lei de Darcy;
- 2) é válido supor uma concentração média de soluto em cada seção transversal;
- 3) a dispersão hidrodinâmica é proporcional ao gradiente de concentrações médias;
- 4) define-se um elemento representativo de volume (E.R.V.) como sendo o menor volume, em torno de um ponto, tal que a adição de qualquer volume infinitesimal de meio poroso tem efeitos desprezíveis sobre as propriedades do meio, como por exemplo, a porosidade.

O problema de dispersão hidrodinâmica é formulado inicialmente num nível microscópico, onde se determina o pequeno

fluxo de massa de soluto que escoar por um elemento de fluido no interior dos poros. O passo seguinte é estabelecer o balanço de massa para um E.R.V., determinando-se o fluxo de massa que passa por cada face do mesmo. Para tanto é feita uma média entre todos os pequenos fluxos de massa resultantes de elementos de fluido que pertençam à mesma face do E.R.V.. Tendo-se o fluxo de massa médio através de cada face, obtém-se, sem dificuldade, a equação geral, macroscópica da dispersão hidrodinâmica num meio poroso (Bear, 1979). Esta equação também é referida como equação de transporte de massa, uma vez que nela estão englobadas todas as formas pela qual há transferência de massa de soluto entre duas seções no meio poroso.

II.2 O ESQUEMA DE DISPERSÃO

Sempre que se quer estudar o escoamento de fluidos miscíveis, é necessário estabelecer uma equação de conservação de massa para cada constituinte do sistema considerado.

No caso de poluição de águas subterrâneas, considera-se, em geral, só dois constituintes: a água (solvente) e um poluente (soluto). Assim sendo, são necessárias duas equações de conservação de massa.

A primeira, denominada equação de fluxo, é a equação de continuidade para a mistura. Ela é deduzida levando-se em conta o balanço de massas para a mistura, a Lei de Darcy, duas equações de estado, que relacionam, respectivamente, densidade e

viscosidade às variações de pressão e de concentração, e uma equação que relaciona porosidade às variações de pressão. Como resultado obtém-se uma equação envolvendo duas incógnitas: a pressão e a concentração do poluente.

A segunda equação, denominada equação de transporte de massa (ou equação de dispersão), é deduzida a partir do balanço de massas para o soluto, levando-se em conta a Lei de Fick e uma equação de estado. A equação que se obtém contém duas variáveis dependentes, concentração do soluto e velocidade da mistura.

Fried (1975) denominou esquema de dispersão a esse conjunto de equações, dadas por:

1. Equação de transporte de massa (Bear, 1979)

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} = - \operatorname{div} \left[c \vec{q} - \phi \vec{D}_h \cdot \operatorname{grad} c \right] - \phi \lambda c - c_p Q \quad (\text{II-1})$$

2. Equação de continuidade (Bear, 1979)

$$\frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} = - \operatorname{div} \left[\rho \vec{q} \right] - \rho_p Q \quad (\text{II-2})$$

3. Equação (ou lei) de Darcy

$$\vec{q} = - \frac{k}{\mu} \operatorname{grad}(p + \rho g z) \quad (\text{II-3})$$

4. Equações de estado

$$\begin{aligned} \rho &= \rho(p, c) & ; & & \mu &= \mu(c) & ; \\ \phi &= \phi(p) & e & & D_d &= D_d(c) & \quad (II-4) \end{aligned}$$

onde:

c - concentração do poluente $\left[ML^{-3} \right]$;

ϕ - porosidade, adimensional;

\vec{q} - vetor de vazão específica (vazão por unidade de área) $\left[LT^{-1} \right]$;

\vec{D}_h - tensor do coeficiente de dispersão hidrodinâmica $\left[L^2T^{-1} \right]$;

λ - constante de decaimento radioativo $\left[T^{-1} \right]$;

C_p - concentração do poluente numa fonte ou sorvedouro $\left[ML^{-3} \right]$;

Q - vazão de uma fonte ou sorvedouro por unidade de volume da solução $\left[T^{-1} \right]$;

ρ - densidade da solução $\left[ML^{-3} \right]$;

ρ_p - densidade do fluido produzido numa fonte ou sorvedouro $\left[ML^{-3} \right]$;

k - permeabilidade intrínseca $\left[L^2 \right]$;

μ - viscosidade da mistura $\left[ML^{-1}T^{-1} \right]$ ou $\left[FL^{-2}T \right]$;

p - pressão da mistura $\left[ML^{-1}T^{-2} \right]$ ou $\left[FL^{-2} \right]$;

g - aceleração da gravidade $\left[LT^{-2} \right]$;

z - carga de altura (potencial) $\left[L \right]$;

D_d - coeficiente de difusão molecular $\left[L^2T^{-1} \right]$

completam esse esquema as condições iniciais e de contorno específicas para cada problema.

Matematicamente falando, o esquema de dispersão é um sistema de equações diferenciais parciais não lineares, uma vez que os coeficientes da equação de transporte de massa dependem, indiretamente, da concentração. Eles dependem da velocidade da mistura (solução), que é função da viscosidade e da densidade da mistura e que, por sua vez, dependem da concentração do poluente (soluto).

Não há nenhum método que possa resolver diretamente o esquema de dispersão. Há duas maneiras de se aplicar esse esquema: 1) a densidade e a viscosidade variam com a concentração (caso geral); e 2) a densidade e a viscosidade podem ser consideradas constantes (caso de traçadores).

No caso geral há uma dependência entre a equação de fluxo e a equação de transporte de massa: os coeficientes da segunda equação dependem da velocidade e a velocidade, através da densidade e viscosidade da mistura, depende da concentração do soluto. Não sendo possível obter simultaneamente a solução do sistema, utiliza-se um procedimento iterativo, onde os

cálculos são feitos por intervalos de tempo finitos. Admite-se que em cada intervalo de tempo a viscosidade e a densidade são constantes. Maiores detalhes podem ser encontrados em Fried (1975).

No caso de traçadores é eliminada a dependência que existe entre as equações de fluxo e de transporte de massa (velocidade independe da concentração) e o esquema de dispersão passa a ser um sistema de equações diferenciais parciais lineares. O procedimento de resolução consiste em:

1. resolver a equação de fluxo em termos de pressões ou cargas hidráulicas;
2. determinar as velocidades da mistura, através da equação de Darcy;
3. determinar, a partir das velocidades, os coeficientes da equação de transporte de massa; e
4. resolver a equação de transporte de massa, obtendo a distribuição da concentração do soluto.

Em termos de poluição de águas subterrâneas, pode-se admitir que as diversas formas de poluição comportam-se como traçadores, mantendo constante a densidade e a viscosidade da mistura. Com base nesta hipótese, apresenta-se a seguir a formulação do esquema de dispersão para tratar o caso de poluição em aquíferos. O caso onde se considera a densidade como variável,

mantendo a viscosidade constante, pode ser encontrado em Reddell e Sunada (1970).

II.3 RESUMO DAS HIPÓTESES ASSUMIDAS PARA A APLICAÇÃO DO ESQUEMA DE DISPERSÃO À POLUIÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Na dedução das equações de fluxo e de transporte de massa, assumem-se as seguintes hipóteses:

1. é válida a Lei de Darcy, sendo que o gradiente de carga piezométrica é o único responsável pelo fluxo da água subterrânea;
2. os poluentes se comportam como traçadores;
3. os gradientes de densidade, viscosidade e temperatura da mistura não afetam a distribuição de velocidades;
4. os efeitos de difusão molecular são desprezíveis;
5. a porosidade é constante no tempo e no espaço;
6. a condutividade hidráulica é constante no tempo;
7. as variações verticais da carga piezométrica e da concentração são desprezíveis;

8. não ocorrem reações químicas ou decaimentos radioativos que afetem a concentração do soluto, as propriedades do fluido ou as do aquífero; e
9. o aquífero é homogêneo e isotrópico com relação aos coeficientes de dispersão.

II.4 EQUAÇÃO DE FLUXO

A dedução da equação de fluxo pode ser encontrada em Jacob (1950), Cooper (1966), Reddell e Sunada (1970) e Bear (1972, 1979), entre outros. De acordo com Jacob (1950), considerando-se escoamento bidimensional de um fluido compressível, num aquífero não homogêneo, a equação de fluxo (eq. (II-2)) pode ser posta na forma (coordenadas cartesianas e notação tensorial):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[T_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] = S \frac{\partial h}{\partial t} + W(x,y,t) \quad i,j=1,2 \quad (\text{II-5})$$

onde:

h - carga piezométrica $\left[L \right]$;

T_{ij} - tensor das transmissibilidades $\left[L^2 T^{-1} \right]$;

S - coeficiente de acumulação, adimensional;

W - vazão de retirada (positivo) ou de recarga (negativo) por unidade de área $\left[L T^{-1} \right]$;

x_i e x_j - coordenadas cartesianas $[L]$; e

t - tempo $[T]$.

O termo $W(x,y,t)$ pode ser expresso por:

$$W(x,y,t) = Q(x,y,t) - \frac{K_z}{m} (H_s - h) \quad (\text{II-6})$$

onde:

Q - vazão de retirada (+) ou de recarga (-) por unidade de área $[LT^{-1}]$;

K_z - condutividade hidráulica vertical de uma camada semipermeável, leito de rios ou lagos $[LT^{-1}]$;

m - espessura da camada semipermeável, leito de rios ou lagos $[L]$; e

H_s - carga piezométrica existente na camada semipermeável, leito de rios ou lagos $[L]$.

Na equação (II-6) o termo $Q(x,y,t)$ representa recargas ou retiradas diretas, tais como bombeamento, injeção por poços ou evapotranspiração. O termo $(K_z/m)(H_s-h)$ representa fluxos de infiltração de, ou para, o aquífero através de camadas confinantes semipermeáveis, de leitos de rios ou de lagos.

A equação de Darcy é dada, em notação tensorial, por:

$$V_i = - K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (\text{II-7})$$

onde:

V_i - velocidade média macroscópica do fluxo na direção de x_i $[LT^{-1}]$; e

K_{ij} - tensor de condutividade hidráulica $[LT^{-1}]$.

A velocidade intersticial ou velocidade de percolação, necessária para o cálculo dos coeficientes da equação de transporte de massa, é obtida da velocidade de Darcy através da relação:

$$U_i = \frac{V_i}{\phi} = \frac{K_{ij}}{\phi} \cdot \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (\text{II-8})$$

onde:

U_i - velocidade intersticial $[LT^{-1}]$; e

ϕ - porosidade efetiva do aquífero, adimensional.

II.5 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA

A equação de transporte de massa, ou equação de dispersão, foi deduzida por Reddell e Sunada (1970), Bear (1972), Bredehoeft e Pinder (1973) e Konikow e Grove (1977) (equação (II-1)). A forma bidimensional dessa equação, considerando invariável a porosidade e ausência de decaimento radioativo, é dada em coordenadas cartesianas por (Konikow e Grove, 1977):

$$\frac{\partial}{\partial t} (cb) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[b D_{h_{ij}} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[bcU_i \right] - \frac{c'W}{\phi} \quad (\text{II-9})$$

onde:

- c - concentração do poluente $\left[\text{ML}^{-3} \right]$;
- $D_{h_{ij}}$ - coeficiente de dispersão hidrodinâmica, tensor de segunda ordem $\left[\text{L}^2\text{T}^{-1} \right]$;
- b - profundidade saturada do aquífero $\left[\text{L} \right]$;
- U_i - velocidade intersticial $\left[\text{LT}^{-1} \right]$;
- c' - concentração do poluente numa fonte ou sorvedouro de fluido $\left[\text{ML}^{-3} \right]$;
- W - vazão de uma fonte ou sorvedouro por unidade de área $\left[\text{LT}^{-1} \right]$;
- ϕ - porosidade efetiva do aquífero, adimensional;
- x_i, x_j - coordenadas cartesianas $\left[\text{L} \right]$; e
- t - tempo $\left[\text{T} \right]$.

Konikow e Grove (1977, pg. 61), considerando a profundidade saturada b como uma variável e expandindo o termo convectivo, mostram que a equação (II-9) pode ser posta na forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[b D_{h_{ij}} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] - U_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + \frac{c \left[S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \phi \frac{\partial b}{\partial t} \right] - c'W}{\phi b} \quad (\text{II-10})$$

O coeficiente de dispersão hidrodinâmica é dado por:

$$D_{h_{ij}} = D_{ij} + D_d \tau_{ij} \quad (\text{II-11})$$

onde:

D_{ij} - coeficiente de dispersão mecânica, tensor de segunda ordem $\left[L^2 T^{-1} \right]$;

τ_{ij} - fator de tortuosidade do aquífero, tensor de segunda ordem, adimensional; e

D_s - coeficiente de difusão molecular $\left[L^2 T^{-1} \right]$.

Em geral, o fenômeno de poluição de águas subterrâneas ocorre no regime de pura dispersão mecânica, onde os efeitos de difusão molecular são desprezíveis. Desse modo, $D_{h_{ij}} = D_{ij}$.

O coeficiente de dispersão mecânica pode ser relacionado à velocidade da água subterrânea, através da equação (Bear, 1979):

$$D_{ij} = \alpha_{ijmn} \frac{U_m U_n}{|U|} \quad (\text{II-12})$$

onde:

α_{ijmn} - dispersividade do aquífero $[L]$;

U_m e U_n - componentes da velocidade intersticial nas direções m e n, respectivamente $[LT^{-1}]$; e

$|U|$ - magnitude do vetor velocidade $[LT^{-1}]$.

Para um meio poroso isotrópico, a dispersividade α_{ijmn} pode ser relacionada a duas constantes, α_L e α_T , respectivamente, as dispersividades longitudinal e transversal (Scheidegger, 1961 e Bear, 1979). A dispersividade do meio poroso pode, então, ser expressa por (Scheidegger, 1961):

$$\alpha_{ijmn} = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{mn} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}) \quad (\text{II-13})$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ se $i=j$ e $\delta_{ij}=0$ se $i \neq j$). Combinando as equações (II-12) e (II-13), obtém-se:

$$D_{ij} = \alpha_T |U| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_i U_j}{|U|} \quad (\text{II-14})$$

Considerando-se coordenadas cartesianas e componentes U_x e U_y para a velocidade, obtém-se:

$$D_{xx} = \alpha_T |U| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_x^2}{|U|} = \frac{\alpha_T U_y^2 + \alpha_L U_x^2}{|U|} \quad (\text{II-15.a})$$

$$D_{xy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_x U_y}{|U|} = D_{yx} \quad (\text{II-15.b})$$

$$D_{yy} = \alpha_T |U| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{U_y^2}{|U|} = \frac{\alpha_T U_x^2 + \alpha_L U_y^2}{|U|} \quad (\text{II-15.c})$$

Se as coordenadas cartesianas são escolhidas tais que um dos eixos coincide com a direção da velocidade média uniforme \bar{U} , então, (II-15) reduz-se a:

$$D_{xx} = \alpha_L |U|; \quad D_{yy} = \alpha_T |U| \quad \text{e} \quad D_{xy} = D_{yx} = 0 \quad (\text{II-16})$$

Nesse caso, os coeficientes D_{xx} e D_{yy} são os valores principais do tensor dos coeficientes de dispersão mecânica, sendo denominados, respectivamente, coeficientes de dispersão longitudinal (D_L) e transversal (D_T). Os eixos do sistema de coordenadas, onde se verifica (II-16), são os eixos principais de dispersão. Logo, o conjunto de equações (II-15) pode ser reescrito em função dos coeficientes principais de dispersão, $D_L = \alpha_L |U|$ e $D_T = \alpha_T |U|$, como

$$D_{xx} = D_L \frac{(U_x)^2}{|U|^2} + D_T \frac{(U_y)^2}{|U|^2} \quad (\text{II-17.a})$$

$$D_{yy} = D_T \frac{(U_x)^2}{|U|^2} + D_L \frac{(U_y)^2}{|U|^2} \quad (\text{II-17.b})$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \frac{U_x U_y}{|U|^2} \quad (\text{II-17.c})$$

II.6 SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA UNIDIMENSIONAL

Para o caso unidimensional, considerando-se tão somente dispersão longitudinal e velocidade constante para um fluido num meio poroso semi-infinito, homogêneo e isotrópico, a equação (II-10) reduz-se a:

$$D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (\text{II-18})$$

Uma solução analítica para esta equação sujeita às seguintes condições inicial e de contorno,

$$\left. \begin{aligned} c(x > 0, t = 0) &= 0 \\ c(x = 0, t \geq 0) &= c_0 \\ c(x = \infty, t \geq 0) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-19})$$

foi obtida por Ogata e Banks (1961), através de transformadas de Laplace, na forma:

$$\begin{aligned} \frac{c(x,t)}{c_0} &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left[\frac{Ux}{D_L} \right] \cdot \\ &\cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x+Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-20})$$

onde

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-w^2) dw \quad (\text{II-21})$$

$$e \quad \text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-w^2) dw \quad (\text{II-22})$$

Ainda segundo Ogata e Banks, o segundo termo da equação (II-20) poderá ser desprezado com um erro menor que 5% quando (Ux/D_L) é maior que 135 e com erro menor que 3% quando (Ux/D_L) é maior que 500.

No desenvolvimento de estudos experimentais ou numéricos é interessante trabalhar-se com a forma adimensional da equação (II-18), uma vez que todos os parâmetros característicos do problema podem ser agrupados num único número adimensional, o número de Brenner, dado por (Brenner, 1962):

$$\text{Br} = \frac{UL}{D_L} \quad (\text{II-23})$$

onde L é o comprimento entre dois pontos de interesse no meio poroso, ou o comprimento de uma coluna porosa num experimento.

Através da mudança de variáveis $X = x/L$, $T = Ut/L$ e $C = c/c_0$, pode-se reescrever a equação (II-18) na forma

$$\frac{1}{\text{Br}} \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - \frac{\partial C}{\partial X} = \frac{\partial C}{\partial T} \quad (\text{II-24})$$

que sujeita às condições iniciais e de contorno,

$$\left. \begin{aligned} C(X > 0, T = 0) &= 0 \\ C(X = 0, T > 0) &= 1 \\ C(X = \infty, T > 0) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-25})$$

admite a seguinte solução analítica adimensionalizada:

$$C(X,T) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{X - T}{2\sqrt{T/Br}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left[Br.X \right] \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{X + T}{2\sqrt{T/Br}} \right] \quad (\text{II-26})$$

Nessa forma, o tempo adimensional $T = Ut/L$ corresponde à relação entre o volume de líquido (V_ℓ) escoado após o instante inicial de injeção e o volume de poros (V_p) do meio poroso considerado, representando, pois, a percentagem do volume de poros que contém o líquido injetado, no tempo t ; ou seja:

$$T = \frac{Ut}{L} = \frac{V_\ell}{V_p} \quad (\text{II-27})$$

II.7 SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA BIDIMENSIONAL SIMPLIFICADA

Na figura II-4 está esquematizado um caso bidimensional simplificado, para o qual Bruch e Street (1967) obtiveram uma solução analítica.

Considerando velocidade constante, para um fluido num meio poroso homogêneo e isotrópico, onde os eixos do tensor de dispersão estão alinhados com os eixos cartesianos, a equação (II-10) pode ser assim escrita para o caso da figura II-4:

$$D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (\text{II-28})$$

sujeita às condições iniciais e de contorno:

$$c(x=0, y, t>0) = c_0 \quad 0 \leq y \leq b$$

$$c(x=0, y, t>0) = 0 \quad b < y < \ell$$

$$c(x, y, t=0) = 0$$

$$c(x=\infty, y, t>0) = \text{Limitada}$$

$$\frac{\partial c}{\partial y} (x, y=0, t>0) = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial y} (y, y=\ell, t>0) = 0 \quad (\text{II-29})$$

Bruch e Street (1967) apresentaram uma solução analítica, para esse esquema simplificado, na forma de séries, dada por:

$$\begin{aligned} c(x,y,t) = & \frac{bc_0}{2\ell} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \frac{bc_0}{2\ell} \exp \left[\frac{Ux}{D_L} \right] \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x+Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ F_n \cdot \cos \left[\frac{n\pi}{\ell} \cdot y \right] \cdot \exp \left[\frac{x}{2} \left(\frac{U}{D_L} - J_n \right) \right] \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x-J_n D_L t}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ F_n \cdot \cos \left[\frac{n\pi}{\ell} \cdot y \right] \cdot \exp \left[\frac{x}{2} \left(\frac{U}{D_L} + J_n \right) \right] \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x+J_n D_L t}{2\sqrt{D_L t}} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$(\text{II-30})$$

onde

$$J_n = \left[\left(\frac{U}{D_L} \right)^2 + \left(\frac{2n\pi}{\ell} \right)^2 \cdot \frac{D_T}{D_L} \right]^{1/2} \quad (\text{II-31})$$

$$F_n = \left[\frac{2c_o}{\pi n} \cdot \sin \left(\frac{n\pi}{\ell} b \right) \right] \quad (\text{II-32})$$

Harleman e Rumer (1963), desprezando o termo de dispersão longitudinal, obtiveram a seguinte solução analítica aproximada para o estado estacionário:

$$\frac{c}{c_o} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{y-b}{2\sqrt{D_T x/U}} \right] \quad (\text{II-33})$$

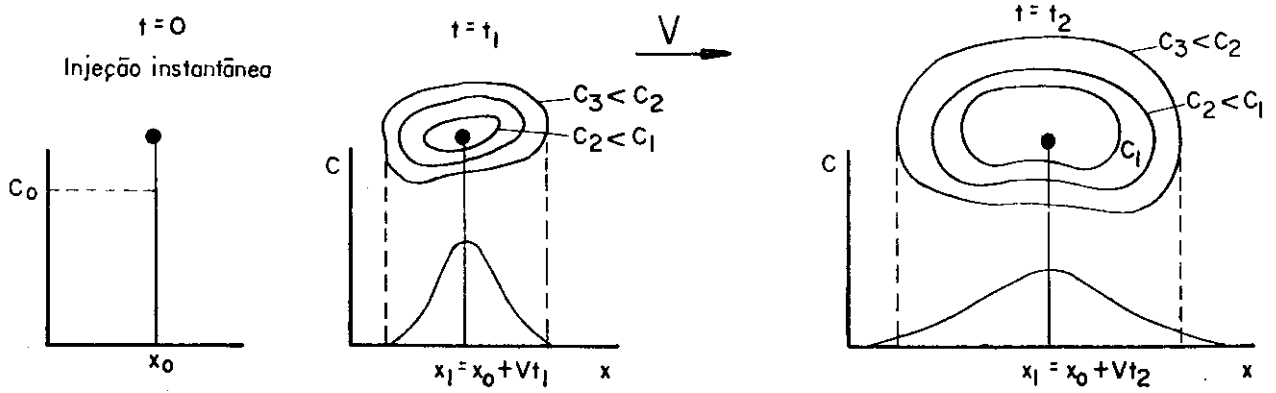


FIGURA II-1 — Visualização dos fenômenos de dispersão e difusão molecular.

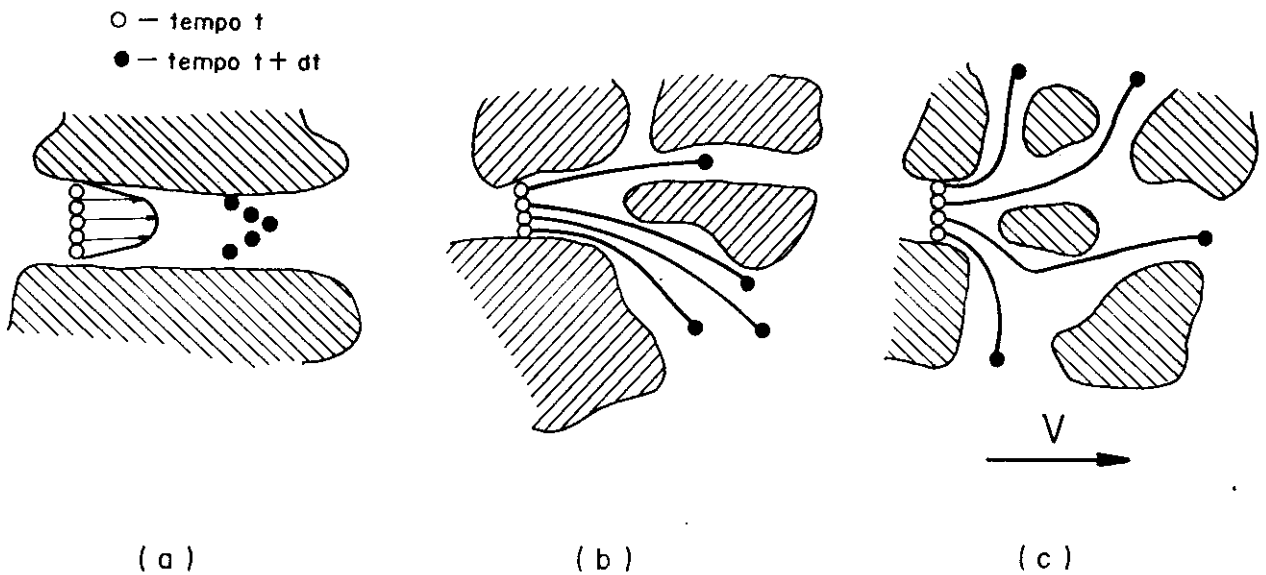


FIGURA II-2 — Esquema simplificado das causas que originam a dispersão (espalhamento mecânico).

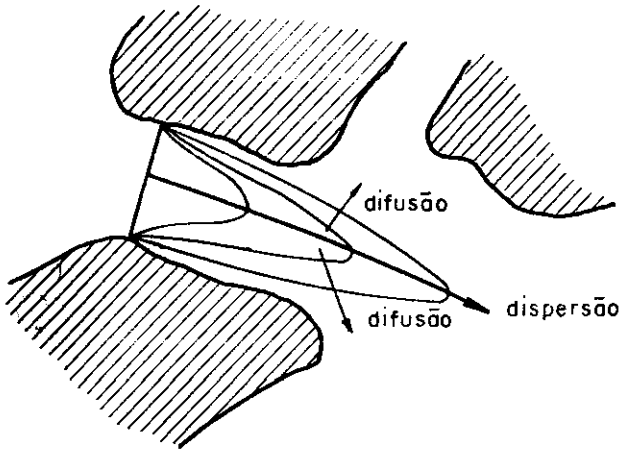


FIGURA II-3 — Evolução do perfil de dispersão, mostrando os efeitos da difusão, numa tentativa de se diminuir os gradientes de concentração.

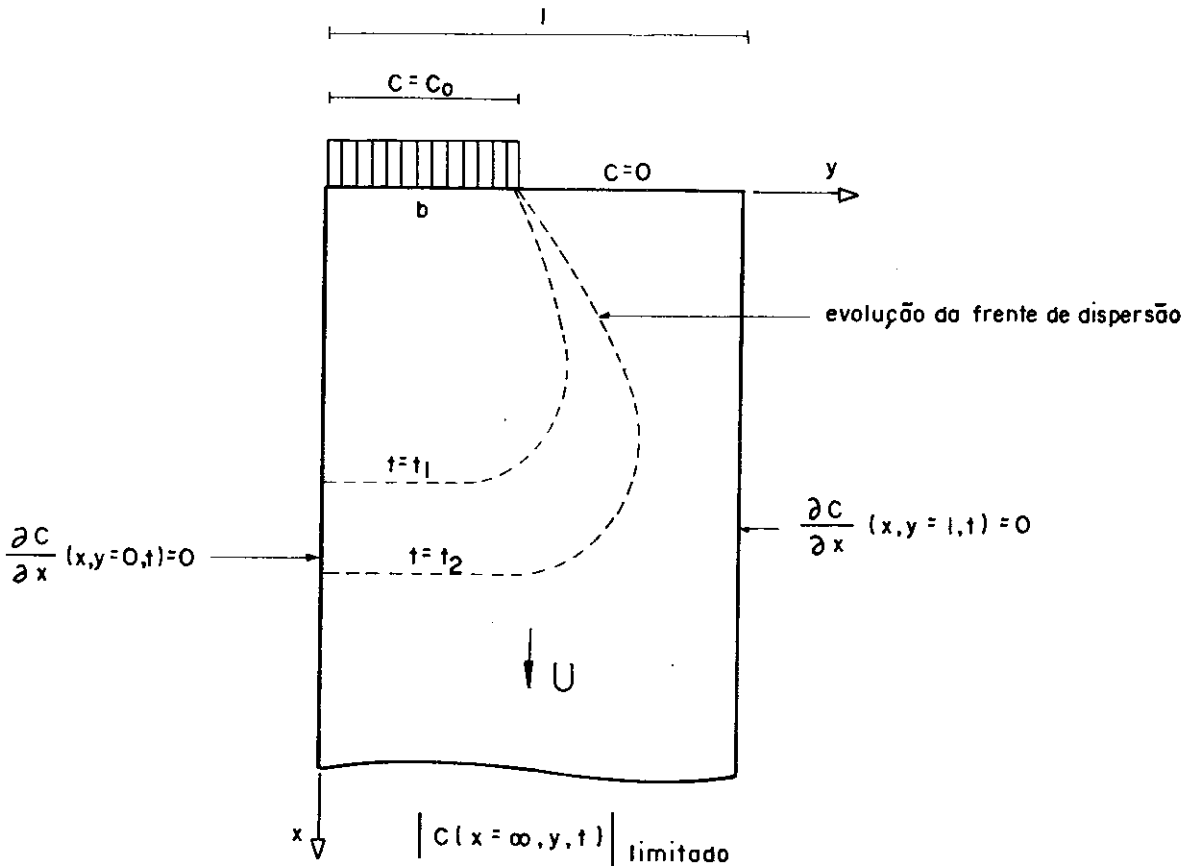


FIGURA II-4 — Problema bidimensional simplificado para o qual é possível obter-se uma solução analítica.

CAPÍTULO III

ANÁLISE NUMÉRICA PARA A EQUAÇÃO DE
TRANSPORTE DE MASSA

O esquema de dispersão, no caso de traçadores, resume-se praticamente a duas equações diferenciais - equação de fluxo (eq. (II-5)) e equação de transporte de massa (eq. (II-9)) - para as quais, em geral, não é possível obter soluções analíticas nos casos da prática, sendo necessário recorrer-se a métodos numéricos.

Neste estudo estas equações são resolvidas de acordo com a metodologia de diferenças finitas, que, em geral, fornece resultados suficientemente precisos, face à qualidade dos dados disponíveis sobre as características dos aquíferos.

A análise numérica da equação de fluxo, fora do escopo deste trabalho, pode ser encontrada em Pinder e Bredehoeft (1968), Pricket e Lonquist (1971) e Trescott et alii (1976), entre outros.

Com relação ao tratamento numérico da equação de transporte de massa, vários métodos podem ser encontrados na literatura, todos com o objetivo de eliminar os problemas típicos de oscilação e amortecimento que surgem com a aplicação de métodos numéricos. Como a maioria desses métodos foi proposta para

o caso unidimensional, surge a necessidade de se verificar se eles são viáveis para casos bidimensionais e, caso o sejam, de se determinar as suas respectivas faixas de aplicação.

Desse modo, a análise numérica para a equação de transporte de massa será feita da seguinte maneira: 1) introdução sobre a metodologia de diferenças finitas, descrevendo os problemas que surgem na sua aplicação à equação (II-18) e apresentando os métodos propostos para se eliminar tais problemas; e 2) comparações desses métodos com soluções analíticas conhecidas (casos uni e bidimensionais).

III.1 METODOLOGIA DE DIFERENÇAS FINITAS

Nos métodos de diferenças finitas, a idéia básica é substituir as derivadas das equações diferenciais por taxas de variação das respectivas variáveis sobre um intervalo pequeno, mas, finito. Desse modo, a partir da definição de derivada, tem-se:

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} \quad (\text{III-1})$$

Este tipo de aproximação é feita para um número finito de pontos do domínio, reduzindo um problema contínuo de valor de contorno a um sistema de equações algébricas.

Para aplicação dos métodos de diferenças finitas, o domínio R do problema é subdividido em pequenas células através de uma malha retangular (fig. III-1). O centro de cada célula é chamado nó, sendo identificado por índices (i,j) . Suas posições em relação aos eixos x e y são dadas por $x_i = (i-0,5)\Delta x$ e $y_j = (j-0,5)\Delta y$. Desse modo, as variáveis que representam o problema passam a ser dadas em forma discreta, associadas aos nós de cada célula.

Há três esquemas básicos de diferenças finitas que podem ser usados para se aproximar a derivada de uma função num ponto x :

a) Diferenças Regressivas

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \quad (\text{III-2})$$

b) Diferenças Centradas

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{III-3})$$

c) Diferenças Progressivas

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (\text{III-4})$$

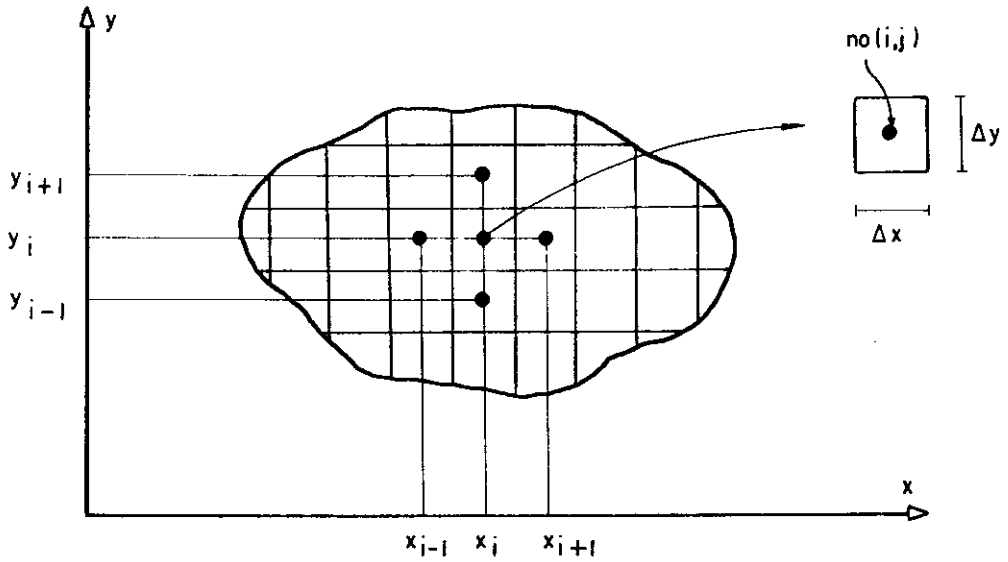


FIGURA III-1 — Discretização de uma região bidimensional.

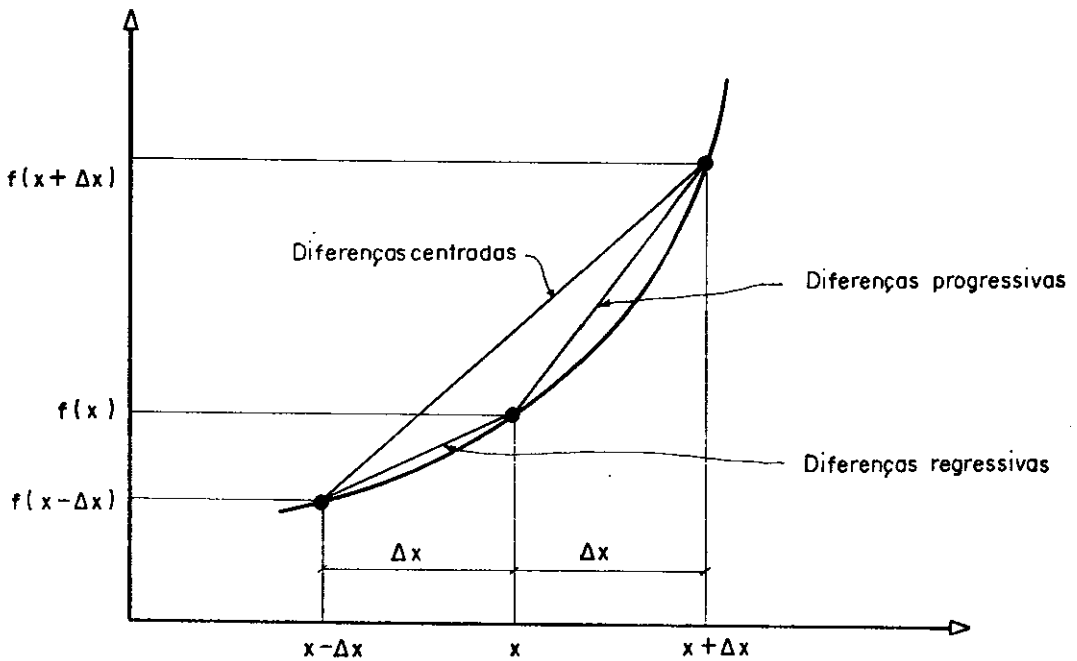


FIGURA III-2 — Interpretação geométrica para as aproximações de diferenças finitas.

A interpretação geométrica dessas aproximações é apresentada na figura III-2. Nota-se que à medida que Δx diminui, as diferenças entre os três esquemas também diminuem.

Demonstra-se, através de séries de Taylor (Remson et alii, 1971 e Fried, 1975) que os esquemas de diferenças progressivas tem um erro de truncamento da ordem de Δx , enquanto o esquema de diferenças centradas tem um erro da ordem de $(\Delta x)^2$. Isto significa que, para uma mesma diminuição de Δx , os erros de truncamento diminuem mais rapidamente no segundo caso do que no primeiro.

A derivada segunda pode ser aproximada por

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (\text{III-5})$$

onde o erro de truncamento é da ordem de $(\Delta x)^2$.

Em geral, para se obter a equação de diferenças finitas análoga de uma equação diferencial, usa-se para as derivadas espaciais o esquema de diferenças centradas ou o de diferenças regressivas e para a derivada temporal o esquema de diferenças progressivas (conhece-se o valor das variáveis na data presente t e se quer saber o seu valor numa data futura $t+\Delta t$). As derivadas espaciais podem ser avaliadas tanto no tempo presente t , quanto no tempo futuro $t+\Delta t$. No primeiro caso o esquema é dito explícito e no segundo, implícito. Uma terceira forma é dada pela aproximação de Crank-Nicolson, onde as derivadas es-

paciais são aproximadas pela média das avaliações nos tempos t e $t+\Delta t$.

III.2 APLICAÇÃO DA METODOLOGIA DE DIFERENÇAS FINITAS À EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA

Devido à dificuldade de se resolver diretamente a equação de transporte de massa, levando-se em conta as complexas condições de contorno, torna-se necessário recorrer aos métodos numéricos para se obter soluções de problemas de dispersão.

A aplicação dos métodos de diferenças finitas à equação de transporte de massa depara-se com dois problemas que não estão, ainda, completamente resolvidos: oscilação e amortecimento da solução numérica.

III.2.1 Descrição do Problema

Considere-se, para fins de análise desses problemas, a injeção, sob a forma de uma função degrau, de um fluido contendo um traçador com concentração c_0 , num fluxo unidimensional através de uma coluna porosa (fig. III-3). Esta situação é descrita pela equação (II-18), sujeita às condições inicial e de contorno (II-19). A figura III-4 mostra a curva teórica típica que se obtém durante a evolução da frente de dispersão, bem como as curvas numéricas típicas que resultam da aplicação dos esquemas espaciais de diferenças centradas e regressivas.

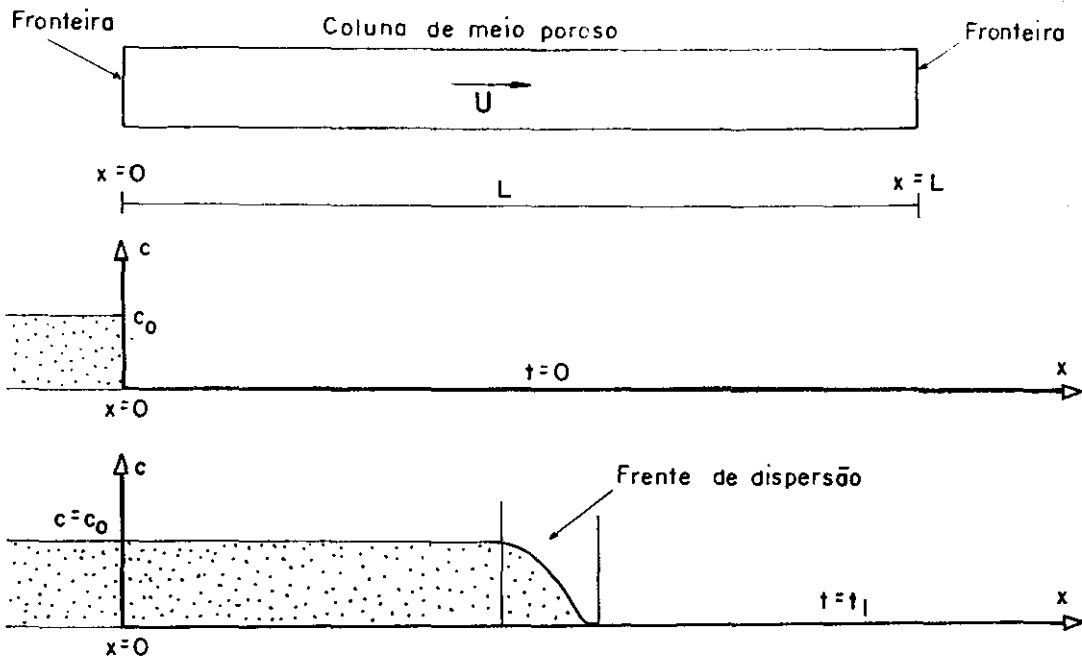


FIGURA III-3 — Injeção em $x=0$ de um fluido contendo traçador com uma concentração $c=c_0$, no instante $t=0$, mostrando a evolução da frente de dispersão para um tempo $t=t_1$

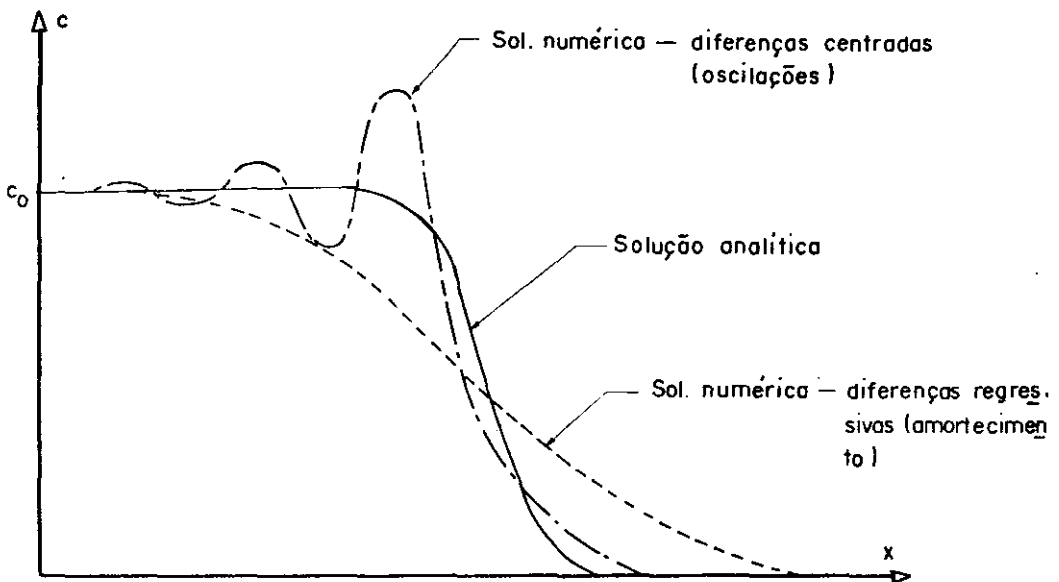


FIGURA III-4 — Problemas típicos que surgem na aplicação dos esquemas de diferenças finitas à equação de dispersão.

A oscilação da solução numérica em torno de $c = c_0$, no trecho à montante da frente de dispersão, é um problema típico do *esquema espacial de diferenças centradas* (V. gráfico III-1). Segundo Peaceman e Rachford (1962) e Chaudhari (1971), essa oscilação é resultado de erros de truncamento espacial (2.^a ordem) nas vizinhanças de gradientes elevados de concentração. As oscilações serão menores, tanto maiores forem o coeficiente de dispersão D_L e o número de intervalos N em que é subdividida a região em estudo.

O amortecimento da solução numérica é um problema típico do *esquema espacial de diferenças regressivas* (V. gráfico III-1). Esse amortecimento, chamado de dispersão numérica, provém dos erros de truncamento espacial e temporal, que são de primeira ordem em Δx e Δt , respectivamente (Lantz, 1971). Reduzindo-se os intervalos Δx e Δt , diminui-se a dispersão numérica.

III.2.2 Métodos Propostos para Eliminação dos Problemas

Vários métodos têm sido propostos para se eliminar, ou pelo menos, atenuar os problemas de oscilação e amortecimento numérico.

Peaceman e Rachford (1962) verificaram que o *esquema espacial de diferenças centradas* descreve razoavelmente bem a frente de dispersão, ao passo que o *esquema de diferenças regressivas* nunca apresenta oscilações (ou excessos). A partir desse fato, propuseram um método, denominado *transferência de*

excessos, que procura aliar os pontos positivos desses dois esquemas. No trecho à montante da frente de dispersão, Peaceman e Rachford utilizam o esquema de diferenças regressivas, que não oscila, e para a frente de dispersão, propriamente dita, o esquema de diferenças centradas que não introduzem dispersão numérica. Segundo Gardner et alii (1964), este método apresenta resultados razoáveis para o caso unidimensional, mas introduz uma dispersão numérica da mesma ordem de grandeza da dispersão física, para o caso bidimensional.

Stone e Brian (1963) propuseram um método implícito de diferenças finitas que envolve *coeficientes de ponderação*, tanto no termo convectivo, quanto no temporal. Para o termo dispersivo ($D_L \partial^2 c / \partial x^2$) usa-se a aproximação de Crank-Nicolson. O valor ótimo desses coeficientes de ponderação foi determinado através de uma análise teórica, considerando para a equação (II-18) soluções teórica e numérica na forma de séries de Fourier. Este método fornece bons resultados para o caso unidimensional. Entretanto, sua extensão ao caso bidimensional não é satisfatória.

Gardner et alii (1964) usaram a idéia do método das características para melhorar a solução numérica da equação de transporte de massa. O transporte convectivo é simulado por meio de pontos móveis, distribuídos uniformemente sobre a malha de discretização da região em estudo, aos quais é atribuída a concentração inicial do elemento em que estavam inicialmente. O transporte dispersivo é simulado por meio de diferenças finitas. Esse método não apresenta oscilações ou dispersão numéri-

ca. Entretanto, como esse método é explícito, ele exige um critério de estabilidade para Δx e Δt . Além disso, a movimentação dos pontos móveis dentro da malha é complexa e trabalhosa.

Price et alii (1968) apresentaram um método numérico de boa acurácia, deduzido a partir do método de Galerkin. A discretização obtida para o caso de funções de base "Chapeau" (lineares) é muito semelhante ao método proposto por Stone e Brian (1963).

Lantz (1971) apresentou algumas explicações para o amortecimento da frente de dispersão. Segundo ele, a dispersão numérica é devida aos erros de truncamento de 1.^a ordem das aproximações dos termos convectivo e temporal, através das equações (III-2) e (III-4). Este tipo de aproximação introduz erros proporcionais à derivada segunda, que equivalem a um segundo coeficiente de dispersão. Desse modo, a solução numérica obtida não corresponde ao problema original e sim a um com um coeficiente de dispersão maior. Daí o amortecimento da solução numérica. Lantz mostrou que esse erro pode ser quantificado em termos de Δx e Δt , facilitando a escolha desses intervalos, para se diminuir a dispersão numérica.

Chaudhari (1971), a partir das idéias de Lantz (1971), apresentou um esquema de diferenças finitas correto até a 2.^a ordem para os termos convectivo e temporal. Esta dedução mais acurada introduz um termo negativo no coeficiente da derivada segunda, chamado coeficiente de dispersão numérica, responsável, em grande parte, pela eliminação do amortecimento da solução nu-

mérica.

Laumbach (1975), por outro lado, apresentou uma dedução onde os erros de truncamento provenientes da discretização dos termos convectivo e temporal cancelam-se mutuamente. Com a hipótese de transporte predominantemente convectivo, Laumbach obtém uma equação discretizada para a equação de transporte de massa, correta até a 4.^a ordem em Δt e Δx . Esse método é implícito, baseado em três pontos espaciais e em dois níveis de tempo.

Cada um desses métodos aborda o problema das soluções numéricas sob diferentes enfoques, que, aparentemente, conduzem a bons resultados para casos unidimensionais. Poucos métodos, foram, efetivamente, aplicados a problemas bidimensionais.

Shamir e Harleman (1967) usaram uma técnica bem interessante, para utilizar o método de Stone-Brian (1963) em casos bidimensionais. Inicialmente, Shamir e Harleman escreveram a equação da dispersão em termos das funções potencial e de corrente (ϕ e ψ). Observando que o vetor velocidade é tangente às linhas de corrente em qualquer ponto, a equação de dispersão que se obtém, segundo eixos ϕ e ψ , é unidimensional em relação ao termo convectivo. Desse modo, puderam usar o método de Stone-Brian para escoamento unidimensional. O problema da dispersão lateral foi contornado através da técnica ADIP (Procedimento implícito de direções alternadas, Fried, 1975). Este método, entretanto, não se aplica a escoamentos não permanentes.

Reddel e Sunada (1970), Konikow e Bredehoeft (1974 e 1978), Konikow (1977) e Robertson (1974) aplicaram, com relativo sucesso, o método das Características, como proposto por Gardner et alii (1964), a problemas bidimensionais.

Como não se conhece um estudo comparativo entre os diversos métodos acima citados, surge a necessidade de se verificar o desempenho dos mesmos frente a situações unidimensionais e bidimensionais.

Partindo do princípio de que um bom desempenho em situações complexas pressupõe um desempenho igual ou melhor em situações mais simples, será feita a seguir uma comparação unidimensional entre os diversos métodos acima descritos. Para aqueles que demonstrarem melhor desempenho, será feita uma comparação bidimensional, com o objetivo de se determinar as condições de aplicabilidade de cada método. Os resultados destas comparações estão apresentados nos itens III.3 e III.4.

III.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS NUMÉRICOS PROPOSTOS

- CASO UNIDIMENSIONAL

Este item tem por objetivo apresentar, para o caso unidimensional, uma comparação entre os diversos métodos numéricos de diferenças finitas apresentadas no item III.2.

A equação de transporte de massa é colocada sob a forma adimensional (eq. (II-24)) e somente três parâmetros indepen

dentes são considerados: o número de Brenner ($Br = UL/D_L$), o intervalo de tempo adimensional (ΔT) e o número de elementos em que a região de interesse é discretizada ($NX = 1/\Delta X$).

O desempenho de cada método é analisado através de um estudo paramétrico onde, inicialmente, é verificada apenas a influência dos parâmetros de discretização ΔT e ΔX . É feito, a seguir, o estudo paramétrico para o número de Brenner, visando verificar qual a influência dos fatores físicos no comportamento dos métodos numéricos (van Genuchten, 1976).

III.3.1 Critérios de Comparação

No tocante à acurácia de uma solução numérica com relação a uma analítica, os critérios de comparação utilizados pela maioria dos autores restringem-se, quase que exclusivamente, à inspeção visual e ao máximo desvio absoluto entre as soluções. Dentre os trabalhos analisados, somente Price et alii (1968) apresentam comparações tendo como critério, além desses dois, o tempo de processamento. Visando uma melhor avaliação dos métodos, neste estudo serão utilizados os seguintes critérios:

- a. *Inspeção visual* - é o processo mais simples de comparação que, embora tendo um certo grau de subjetividade, permite determinar a qualidade do ajuste sob a forma bom, regular ou ruim, verificando, também, a presença de oscilações e amortecimentos;

- b. *Máximo desvio absoluto* ($\Delta_{\text{máx}}$) - é definido como o máximo valor do módulo da diferença, em cada ponto, entre a solução analítica e a solução numérica, ou seja:

$$\Delta_{\text{máx}}(T) = \max_{1 \leq i \leq N} \left| C_i^A(T) - C_i^N(T) \right| \quad (\text{III-6})$$

onde $C_i^A(T)$ é a concentração obtida com a solução analítica e $C_i^N(T)$ é a concentração obtida com a solução numérica, no ponto i , para o tempo T . Entretanto, este critério não é suficiente para descrever o comportamento dos desvios ao longo de toda a curva. Pode acontecer que somente um ponto apresente desvio, ou que todos os pontos apresentem desvios da mesma ordem de grandeza. Essa informação, sobre a uniformidade dos desvios, pode ser obtida através da somatória do módulo dos desvios;

- c. *Somatória do módulo dos desvios* ($\Sigma\Delta$) - permite uma rápida visualização da porcentagem de participação de $\Delta_{\text{máx}}$ em relação ao desvio total ($\Sigma\Delta$), sendo possível determinar, entre dois métodos, qual o que apresenta melhor aderência; e
- d. *Tempo de processamento* (τ) - permite determinar qual método é mais rápido, pois, embora um método possa ser extremamente acurado, o tempo gasto para se obter os resultados numéricos pode inviabilizá-lo em aplicações práticas.

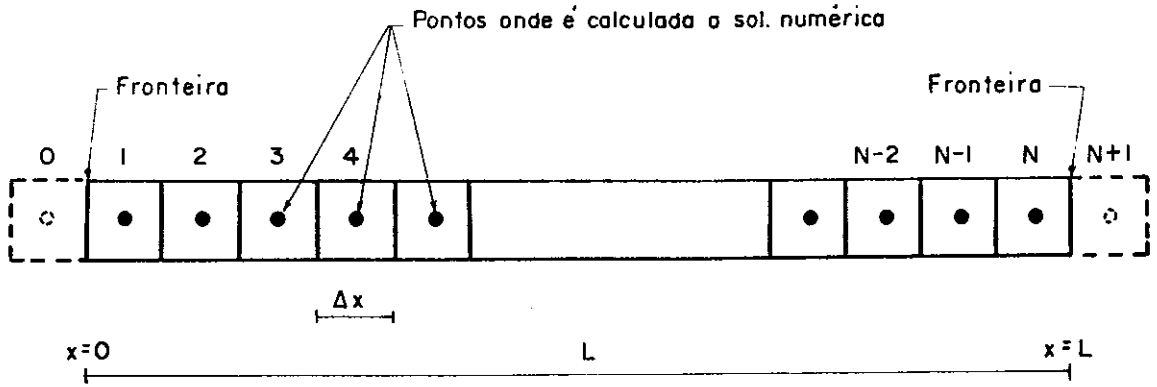
III.3.2 Caso Unidimensional Analisado

O caso unidimensional para o qual há solução analítica, consiste em uma coluna porosa de comprimento L , por onde escoar um fluido com velocidade média intersticial constante U . A partir do instante de tempo $t=0$, injeta-se, em $x=0$, continuamente, um outro fluido contendo traçador com uma concentração c_0 , conforme esquema da figura III-3. Este caso é governado pela equação adimensional (II-24).

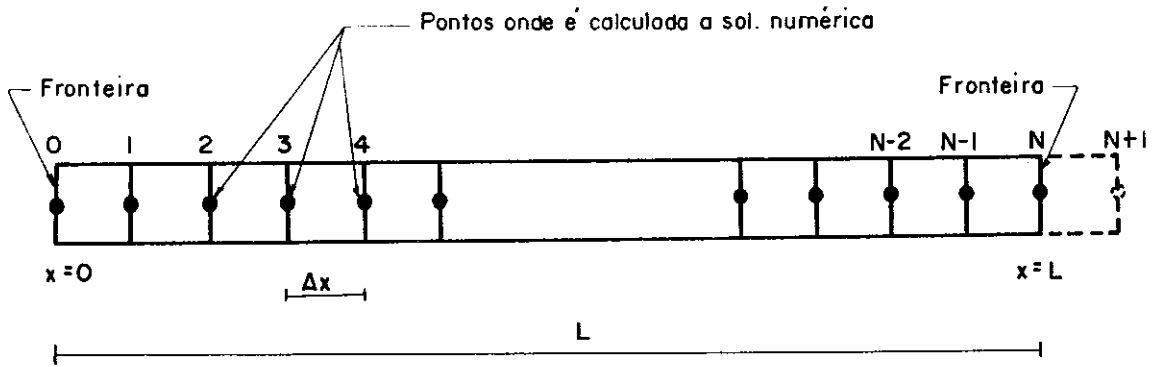
A solução analítica dada pela equação (II-26) pode ser aplicada a este problema enquanto a frente de dispersão não alcançar o fim da coluna porosa ($x=L$).

Os dados básicos, para as análises que se seguem, foram obtidos de Peaceman e Rachford (1962), sendo dados por: $U = 0,01411$ cm/s, $D_L = 0,00294$ cm²/s, $L = 182,88$ cm, $\Delta t = 100$ s, $\Delta x = 3,81$ cm. Os parâmetros adimensionais correspondentes são: $Br = 877,7$, $\Delta T = 0,0077154$ e $NX = 48$.

Cabe, ainda, uma observação sobre os pontos em que a solução numérica é calculada. Ela pode ser calculada no centro de um elemento (ou célula) (fig. III-5.a) ou nas suas fronteiras (fig. III-5.b). A primeira aproximação está mais de acordo com o balanço de massas para um elemento, ao passo que a segunda representa melhor as condições de contorno em $x=0$, para este caso particular de injeção sob a forma de uma função degrau. A primeira aproximação foi utilizada para os métodos de Chaudhari, Stone-Brian, Price, Características e Laumbach, enquanto a se-



(a)



(b)

FIGURA III-5 — Posições em que a solução numérica pode ser calculada.(a) no centro da célula —(b) nas fronteiras da célula. As linhas pontilhadas indicam elementos fictícios necessários para simular as condições de contorno.

gunda foi usada para o método de Peaceman-Rachford e para os esquemas espaciais de diferenças finitas, devido a estes esquemas serem relativamente simples, necessitando de condições de fronteira mais bem definidas.

III.3.3 Análise de Sensibilidade para os Parâmetros ΔT e NX

Inicialmente, com o objetivo de se verificar a influência da discretização espacial, foram feitas duas simulações para cada método, uma para $NX = 43$ e outra para $NX = 96$, mantendo fixos o número de Brenner e o intervalo de tempo originais (gráficos III-1 a III-6).

Os resultados obtidos tanto para o esquema espacial de diferenças centradas, quanto para o de diferenças regressivas, são apresentados no gráfico III-1, mostrando, claramente, os dois tipos de problemas encontrados nas soluções numéricas: oscilações e amortecimento (dispersão numérica).

A combinação dos esquemas espaciais de diferenças centradas e regressivas, no método de Peaceman e Rachford (gráfico III-2), mostrou-se eficaz para eliminar as oscilações, mas não foi suficiente para eliminar a dispersão numérica, que persiste mesmo para $NX = 96$.

O método das Características, o método de Stone-Brian-Price e o de Laumbach (gráficos III-3, III-4 e III-6) apresentaram resultados que se ajustam muito bem à curva analítica, seja

para $NX = 48$ ou $NX = 96$. Por simples inspeção visual é difícil distinguir qual dos três é o mais acurado. Tanto o método de Stone-Brian quanto o de Price fornecem os mesmos resultados numéricos e por isso foram denominados Stone-Brian-Price.

Já o método de Chaudhari (gráfico III-5) apresentou um resultado curioso: para $NX = 48$ observa-se oscilações e amortecimento de solução numérica, mas para $NX = 96$ o ajuste é muito bom. Isto sugere um estudo mais detalhado do comportamento do método.

Como o método de Peaceman e Rachford, em comparação com os outros métodos, mostra-se ineficiente para controlar adequadamente o problema de dispersão numérica, ele não será levado em consideração nas análises seguintes.

Mantendo o número de Brenner constante ($Br = 877,7$), foram feitas seis simulações, envolvendo dois valores para NX (48 e 96) e três para ΔT (0,0077154, 0,0038577 e 0,00192885) que correspondem ao valor inicial de ΔT , a $\Delta T/2$ e a $\Delta T/4$, respectivamente. Os métodos são comparados com base nos critérios Δ_{\max} , $\Sigma\Delta$ e τ , cujos valores estão apresentados na tabela III-1, para cada caso analisado. O tempo de processamento (τ) é dado em segundos, sendo que todas as simulações foram feitas no computador Burroughs B6700 do NCE/UFRJ.

Esses resultados (tabela III-1) mostram que os quatro métodos são mais sensíveis à discretização espacial do que à temporal, sendo que os valores de Δ_{\max} e $\Sigma\Delta$ chegam inclusive a

ΔT	MÉTODO	NX = 48			NX = 96		
		$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	$\tau *$	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	$\tau *$
0,0077154	Características	0,081	0,211	4,000	0,018	0,129	7,317
	Stone-Brian-Price	0,067	0,224	2,450	0,039	0,260	4,333
	Chaudhari	0,184	0,956	1,319	0,003	0,029	1,939
	Laumbauch	0,042	0,130	2,383	0,005	0,042	4,150
0,0038577	Características	0,081	0,214	7,317	0,021	0,150	14,183
	Stone-Brian-Price	0,053	0,167	4,333	0,021	0,130	8,267
	Chaudhari	0,223	1,230	1,938	0,073	0,536	3,175
	Laumbauch	0,047	0,148	4,150	0,013	0,098	7,883
0,00192985	Características	0,087	0,225	14,183	0,022	0,156	27,483
	Stone-Brian-Price	0,050	0,157	8,267	0,017	0,118	15,767
	Chaudhari	0,239	1,362	3,175	0,098	0,755	5,650
	Laumbauch	0,048	0,152	7,883	0,015	0,113	14,467

*Tempo de processamento dado em segundos. Simulações feitas no Computador
Burroughs B6700 do NCE/UFRJ

TABELA III-1 - ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS MÉTODOS NUMÉRICOS COM RELAÇÃO AOS PARÂMETROS ΔT E NX
PARA $Br = 877,7$, TENDO COMO CRITÉRIOS $\Delta_{\text{máx}}$, $\Sigma \Delta$ E τ

aumentar, quando se diminui ΔT . Via de regra, os resultados mais acurados são dados pelo método de Laumbach seguindo-se a ele os métodos de Stone-Brian-Price, das Características e de Chaudhari. O melhor resultado, entretanto, foi obtido pelo método de Chaudhari para o caso $NX = 96$ e $\Delta T = 0,0077154$, seja quanto à acurácia ou rapidez de execução.

Outro aspecto interessante a se verificar é como a evolução da frente de dispersão afeta os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$. Os gráficos III-7 a III-10 mostram a variação dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ em função do volume de poros injetado (tempo adimensional T), obtido para cada um dos quatro métodos, considerando $Br = 877,7$, $\Delta T = 0,0077154$ e $NX = 48$. À exceção do método das Características, todos os outros métodos apresentam "curvas" bem comportadas, onde os erros decrescentes quase atingem um patamar. As variações acentuadas que ocorrem próximo de 0% e 100% do volume de poros injetado são devidas à influência das condições de contorno impostas no método numérico. Analisa-se a seguir, separadamente, cada um dos quatro métodos em estudo.

a. Método das Características

Este método apresenta um comportamento irregular com relação aos erros $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$, à medida que a frente de dispersão evolui (gráfico III-7). É nítida a formação de uma envoltória decrescente, tanto para $\Delta_{\text{máx}}$ quanto para $\Sigma\Delta$ (só se apresenta a envoltória), confirmando o descrito por Gardner et alii (1964) e Price et alii (1968) de que os erros oscilam entre um valor máximo e

um mínimo.

Devido a essa oscilação dos erros, a posição da frente de dispersão, com relação à célula de discretização, passa a ser importante. Segundo Price et alii (1968), os erros são menores, quando o ponto de 50% de concentração coincide exatamente com o ponto onde é calculada a solução numérica, num dado tempo T . Para a discretização adotada (fig. III-5.a), onde a solução numérica é calculada no centro de cada célula, o ponto de 50% de concentração para $T = 0,50$ e $NX = 48$ cai na fronteira entre duas células, fornecendo a pior aproximação para a frente de dispersão. Foi simulado, então, um caso para $NX = 47$ e $T = 0,50$, de modo que, nessa situação, o ponto de 50% de concentração caia no centro da célula. Os resultados (gráfico III-11) mostram um ajuste bem melhor da solução numérica. Os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ apresentaram boa redução, como pode ser visto na tabela III-4.,

O tempo de processamento ainda pode ser diminuído, se for empregado um intervalo de tempo ΔT próximo ao intervalo de tempo máximo ($\Delta T_{\text{máx}}$) que, segundo Reddell e Sunada (1970), é dado por:

$$\Delta T_{\text{máx}} = 0,5 (\Delta X)^2 Br \quad (\text{III-7})$$

O gráfico III-12 mostra os resultados obtidos para $NX = 48$, $\Delta T = 0,1667$ e $T = 0,50$ ($\Delta T \approx \Delta T_{\text{máx}}$). Esses resultados podem ser considerados bons, uma vez que, além de $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ encontram-se em níveis compatíveis (tabela III-4), o tempo de processamento re-

duziu-se bem. Considerando acurácia e tempo de processamento, pode-se dizer que esta última simulação apresentou os melhores resultados.

b. Método de Stone-Brian-Price

Com relação à tabela III-1, este método é considerado "comportado", uma vez que diminuições de ΔT ou ΔX levam sempre a diminuições nos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ ou $\Sigma \Delta$. Entretanto, a sensibilidade deste método quanto a ΔT ou ΔX é muito baixa. Para se conseguir diminuições sensíveis nos erros é necessário diminuir muito ΔT ou ΔX . Foi feita uma simulação para $NX = 48$, $Br = 877,7$ e $\Delta T = 0,00096443$ (aproximadamente um décimo do valor do ΔT inicial) cujos resultados encontram-se na tabela III-4 e no gráfico III-13. O nível dos desvios diminuiu, à custa de um tempo de processamento muito grande, mas ainda é superior ao dos outros três métodos.

c. Método de Chaudhari

Este método apresenta uma particularidade interessante. O comportamento dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$ (tabela III-1) sugere a existência de um ΔT ótimo, para o qual os erros seriam mínimos. Esta proposição foi verificada através de três conjuntos de simulações, nas quais se mantinham fixos NX e Br , variando-se ΔT . Os valores adotados foram $NX = 100$ para todas as simulações e $Br_1 = 877,7$, $Br_2 = 1482$ e $Br_3 = 10.000$, respectivamente, para

cada um dos três conjuntos. As curvas de $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ versus ΔT obtidas (gráficos III-14 a III-16) mostram claramente a existência de um ΔT ótimo. Nota-se, também, que há um ΔT crítico, a partir do qual o método se instabiliza. Essa instabilização é devido ao fato de que o método de Chaudhari é explícito e, como tal, exige um critério de convergência, $\Delta T \leq \Delta T_c$. Segundo Küpper e Guerrero (1982), o intervalo de tempo crítico, ou máximo, é dado por:

$$\Delta T_c = \frac{1}{Br} \left[\sqrt{1 + (Br\Delta X)^2} - 1 \right] \quad (\text{III-8})$$

A determinação do intervalo de tempo ótimo (ΔT_o) é difícil e exige algumas tentativas. Küpper e Guerrero (1982) sugerem adotar como primeira aproximação para ΔT_o o valor:

$$\Delta T_s = \Delta X - 2/Br \quad (\text{III-9})$$

Na realidade, o valor de ΔT_o é ligeiramente menor que ΔT_s , conforme pode-se verificar nos gráficos III-14 a III-16.

Esse procedimento foi utilizado na determinação de ΔT_o para o caso padrão, onde $Br = 877,7$ e $NX = 48$. Da equação (III-9) tem-se que $\Delta T_s = 0,01855$. Cinco casos foram, então, simulados para valores de ΔT próximos a ΔT_s , cujos resultados, em termos de $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$, encontram-se na tabela III-2.

NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$
30	0,01666667	0,036	0,149
29	0,01724138	0,022	0,079
28	0,01785714	0,009	0,050
27	0,01851852	0,029	0,125
26	0,01923077	0,061	0,258

TABELA III-2 - VERIFICAÇÃO DE ΔT_o PARA O MÉTODO DE CHAUDHARI, CONSIDERANDO-SE $Br = 877,7$, $NX = 48$ E $T = 0,50$ (NT é o número de intervalos de tempo)

O intervalo de tempo ótimo ocorreu para $\Delta T = 0,01785714$, correspondendo a ele $\Delta_{\text{máx}} = 0,009$ e $\Sigma \Delta = 0,50$ (V. gráfico III-19).

Na tabela III-3 encontram-se resumidos os valores de ΔT_c (eq. (III-8)), ΔT_s (eq. (III-9)) e ΔT_o para os exemplos analisados (gráficos III-14 a III-16 e tabela III-2). Observa-se, nesta tabela, que o valor ótimo de ΔT ocorre próximo a $0,95 \Delta T_s$, tendendo a ΔT_s quando o número de Brenner aumenta.

NX	Br	ΔT_c	ΔT_s	ΔT_o	$\Delta T_o / \Delta T_s$
100	877,7	0,00892535	0,00772132	0,00724638	0,938
100	1482	0,00934798	0,00865047	0,00819672	0,948
100	10000	0,00990050	0,00980000	0,00961538	0,981
48	877,7	0,019725	0,01855465	0,01785714	0,962

TABELA III-3 - MÉTODO DE CHAUDHARI - VALORES DOS INTERVALOS DE TEMPO ΔT_c , ΔT_s E ΔT_o UTILIZADOS NOS EXEMPLOS.

d. Método de Laumbach

Este método foi deduzido com base na hipótese de que o número de Brenner é muito grande. Nessa situação, o método é exato quando o parâmetro $R = \Delta T / \Delta X = \Delta T N X$ é igual a 1,0, ou seja, $\Delta T = \Delta X$. Para se verificar o comportamento dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$ em relação a R, foram feitos três conjuntos de simulações, considerando em cada uma delas Br e NX fixos e ΔT variável. Os valores adotados foram: 1) Br = 877,7 e NX = 48; 2) Br = 877,7 e NX = 96; e 3) Br = 10.000 e NX = 200. Para R foram adotados valores entre 0,2 e 1,0. Pode-se verificar, nos gráficos III-20 a III-22, que os menores valores de $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$ ocorrem para valores de R inferiores a 1,0. Para o primeiro caso, $R_1 = 0,92$; para o segundo, $R_2 = 0,90$; e para o terceiro, $R_3 = 0,95$. Em todos os três casos analisados, observa-se que, para $R=1$, surge uma pequena oscilação no trecho à montante da frente de dispersão, caracterizada pelo aumento de $\Sigma \Delta$ e pelo pequeno valor de $\Delta_{\text{máx}}$. Para $R > 1,0$ o método não converge. Desse modo, pode-se dizer que os melhores resultados ocorrem para valores de R compreendido entre 0,90 e 0,95, observando que R tende a se aproximar de 1,0, quando o número de Brenner aumenta.

e. Análise dos Melhores Resultados de Cada Método

Na tabela III-4 encontram-se os melhores resultados, em termos dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$, $\Sigma \Delta$ e τ , obtidos para cada um dos métodos acima analisados.

As respectivas curvas de dispersão (gráficos III-12, III-13, III-19 e III-23) apresentam resultados bem razoáveis, não sendo possível, só por inspeção visual, determinar qual dos métodos é o melhor. Há que se levar em conta a análise dos erros e do tempo de processamento.

Nesse sentido, o pior desempenho foi apresentado pelo método de Stone-Brian-Price: para atingir o mesmo nível de desvios dos outros métodos gasta um tempo de processamento dez vezes maior.

Os métodos de Laumbach, Chaudhari e Características en contram-se praticamente num mesmo nível de eficiência: o que um ganha em rapidez de execução, perde em acurácia.

MÉTODO	R	NX	NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	$\tau(s)$
Características	0,37	47	65	0,00771540	0,018	0,063	3,93
Características	8,00	47	3	0,16666667	0,033	0,096	0,82
Price	0,05	48	520	0,00096443	0,049	0,155	15,59
Chaudhari	0,86	48	28	0,01785714	0,009	0,050	0,97
Laumbach	0,92	48	26	0,01923077	0,011	0,039	1,32

TABELA III-4 - MELHORES RESULTADOS OBTIDOS PARA OS QUATRO MÉTODOS ANALISADOS, CONSIDERANDO-SE $Br = 877,7$ E $T = 0,50$

Cada um dos métodos apresenta, entretanto, algumas di ficuldades. Para os métodos de Chaudhari e Laumbach há uma cer ta dificuldade em se determinar o ΔT ótimo. Para o método das Características deve-se levar em conta que, para o instante que se quer analisar, o ponto de 50% de concentração deve cair no centro de um elemento; além disso, para que o método seja su-

ficientemente rápido, deve-se usar ΔT próximo a $\Delta T_{\text{máx}}$, o que invariavelmente aumenta os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$.

O método de Stone-Brian-Price não é competitivo com os outros três métodos. Ele necessita de discretizações temporais e espaciais muito pequenas para alcançar o mesmo nível de desvios dos outros métodos, como pode ser verificado na tabela III-4. Por esse motivo ele não será levado em consideração na análise de sensibilidade que se fará, a seguir, para o número de Brenner.

III.3.4 Análise de Sensibilidade para o Parâmetro Br

O número de Brenner ($Br = UL/D_L$) apresenta a vantagem de poder relacionar duas causas diferentes, velocidade e coeeficiente de dispersão, ao mesmo efeito, variação na taxa de transporte de massa, quando a área em estudo é delimitada (L fixo). Assim, a números de Brenner altos correspondem transportes predominantemente convectivos e a números de Brenner baixos, transportes dispersivos.

Se os parâmetros velocidade e coeficientes de dispersão são mantidos constantes, o aumento do número de Brenner implica no aumento da área estudada. Nesse caso, se se quer manter as mesmas características de simulação ($\Delta X = \text{cte}$), de-ve-se aumentar NX adequadamente.

Nesta análise tem-se interesse em estudar a influência da velocidade e do coeficiente de dispersão no desempenho de cada método numérico.

Considerando-se $L = 182,88$ cm, os resultados experimentais obtidos por Rumer (1962), Harleman et alii (1963), Bruch e Street (1967), Lambert (1977) e Klotz et alii (1979), entre outros, levam a números de Brenner na faixa de 600 a 1500, em geral, chegando, em alguns casos, a 14.000 (Chaudhari, 1971) ou, no outro extremo, a 30 (Klotz et alii, 1979).

Desse modo, foram adotados para o número de Brenner os valores $Br_1 = 100$, $Br_2 = 1.000$ e $Br_3 = 10.000$, correspondendo a situações de alto, médio e baixo transporte dispersivo. Para cada número de Brenner foram fixados quatro valores diferentes de NX , 20, 50, 100 e 200. Os intervalos de tempo adotados foram determinados de acordo com os critérios estabelecidos no item III.3.3. Os resultados obtidos para cada método, em termos de $\Delta_{m\acute{a}x}$, $\Sigma\Delta$ e τ , encontram-se nas tabelas III-5 a III-13, sendo a seguir discutidos.

a. Método das Características

De acordo com as conclusões do item III.3.3, o método das Características apresenta o melhor desempenho para intervalos de tempo ΔT próximos a $\Delta T_{m\acute{a}x}$. Assim sendo, adotou-se a relação $\Delta T / \Delta T_{m\acute{a}x}$ como critério para se verificar a influência da redução de ΔT nos desvios $\Delta_{m\acute{a}x}$ e $\Sigma\Delta$, uma vez que a redução de

ΔT só se justifica, enquanto os erros devidos à discretização temporal forem maiores que aqueles devidos à discretização espacial. A tabela III-5 apresenta os valores de $\Delta T_{\text{máx}}$ em função de NX e Br.

Br \ NX	19	49	99	100
100	0,1385	0,0208	0,0051	0,00126
1000	1,385	0,2082	0,051	0,0126
10000	13,85	2,082	0,510	0,1260

TABELA III-5 - VALORES DE $\Delta T_{\text{máx}}$ EM FUNÇÃO DE NX E Br, PARA O MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS (eq. (III-7))

Foram feitas três séries de simulações, levando em conta três valores de $\Delta T / \Delta T_{\text{máx}}$: 1,0, 0,50 e 0,25. Esses resultados encontram-se nas tabelas III-6 a III-8.

Br	NX	NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	19	4	0,1250	0,065	0,227	0,63
	49	24	0,0208	0,042	0,490	1,93
	99	100	0,0050	0,031	0,520	11,44
1000	19	1	0,5000	0,042	0,085	0,57
	49	3	0,1667	0,031	0,088	0,83
	99	10	0,0500	0,028	0,187	1,94
	199	40	0,0125	0,017	0,214	9,79
10000	19	1	0,500	0,009	0,018	0,57
	49	1	0,500	0,039	0,079	0,72
	99	1	0,500	0,089	0,223	0,99
	199	4	0,125	0,028	0,111	2,15

TABELA III-6 - DESEMPENHO DO MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS EM FUNÇÃO DE Br E NX, CONSIDERANDO $\Delta T \approx \Delta T_{\text{máx}}$ E $T = 0,50$

A análise desses resultados mostra que a redução de ΔT , afastando-o de $\Delta T_{\text{máx}}$, é importante em termos da diminuição dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$. O uso de $\Delta T / \Delta T_{\text{máx}} = 0,5$ parece ser o mais indicado, uma vez que forneceu bons resultados para todos os casos. A redução de $\Delta T / \Delta T_{\text{máx}}$ para 0,25 praticamente não afeta os valores de $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$ obtidos para $Br = 1000$ e $Br = 10.000$, exercendo, entretanto, uma pequena influência sobre $\Sigma \Delta$ para números de Brenner pequenos ($Br = 100$). O melhor exemplo desse comportamento é dado para o caso $Br = 10.000$ e $NX = 99$.

Br	NX	NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	19	7	0,071429	0,066	0,192	0,69
	49	48	0,010417	0,031	0,307	3,18
	99	96	0,002551	0,021	0,444	11,01
1000	19	1	0,500	0,042	0,085	0,56
	49	5	0,100	0,011	0,051	0,93
	99	20	0,025	0,012	0,061	2,99
	199	80	0,00625	0,006	0,038	18,27
10000	19	1	0,500	0,009	0,018	0,56
	49	1	0,500	0,039	0,079	0,72
	99	2	0,250	0,025	0,075	1,08
	199	8	0,0625	0,020	0,073	2,98

TABELA III-7 - DESEMPENHO DO MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS EM FUNÇÃO DE Br E NX , CONSIDERANDO $\Delta T \approx 0,5 \Delta T_{\text{máx}}$ E $T = 0,50$

Br	NX	NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	19	15	0,033333	0,044	0,129	0,85
	49	96	0,005208	0,029	0,288	5,69
	99	392	0,001276	0,018	0,350	42,28
1000	19	2	0,250	0,034	0,075	0,59
	49	10	0,050	0,024	0,066	1,19
	99	39	0,012821	0,013	0,060	4,99
	199	159	0,003145	0,011	0,075	35,04
10000	19	1	0,500	0,009	0,018	0,56
	49	1	0,500	0,039	0,079	0,72
	99	4	0,125	0,026	0,064	1,30
	199	16	0,03125	0,015	0,050	4,68

TABELA III-8 - DESEMPENHO DO MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS EM FUNÇÃO DE Br E NX, CONSIDERANDO $\Delta T \approx 0,25 \Delta T_{\text{máx}}$ e $T=0,50$

Uma vantagem deste método é que, à medida que o número de Brenner cresce, pode-se usar intervalos de tempo maiores, sem prejuízo da acurácia do método. Em alguns casos, entretanto, o máximo ΔT ficou limitado a 0,50, devido ao fato de as comparações serem feitas para o instante $T = 0,50$, embora $\Delta T_{\text{máx}}$ fosse maior que 0,50.

Isto permite concluir que o método das Características, para um mesmo nível de desvios, torna-se mais eficiente à medida que o número de Brenner aumenta.

b. Método de Chaudhari

Os resultados apresentados na tabela III-10 são os melhores resultados obtidos para cada caso analisado, correspondendo, portanto, ao ΔT_o .

O valor de ΔT_o foi estimado inicialmente como $0,95 \Delta T_s$, sendo feitas então, algumas simulações em torno desse valor. Em geral, duas ou três simulações foram suficientes. Os valores de ΔT_s encontram-se na tabela III-9.

Br \ NX	20	50	100	200
100	0,030	0,000	- 0,010	-
1000	0,048	0,018	0,008	0,003
10000	0,0498	0,0198	0,0098	0,0048

TABELA III-9 - MÉTODO DE CHAUDHARI - VALORES DOS INTERVALOS DE TEMPO ΔT_s EM FUNÇÃO DE Br E NX (eq. (III-9))

Observa-se que, para $Br = 100$ e $NX > 50$, $\Delta T_s \leq 0$, levando à errônea conclusão que quanto menor fosse ΔT , tanto menores seriam os erros. Mantendo $Br = 100$ constante, foram feitas duas séries de simulações, uma para $NX = 50$ e outra para $NX = 100$, onde se variou o parâmetro ΔT . Os resultados, em termos de $\Delta_{m\acute{a}x}$ e $\Sigma \Delta$ versus ΔT , encontram-se nos gráficos III-17 e III-18, onde se verifica que a curva dos desvios passa por um mínimo muito próximo a ΔT_c (eq. (III-8)).

Para números de Brenner pequenos, portanto, ΔT_s não apresenta nenhuma influência e ressurge a característica natural dos esquemas de diferenças regressivas de apresentarem menores desvios para $\Delta T \approx \Delta T_c$.

Br	NX	NT	$\Delta T_o / \Delta T_s$	ΔT_o	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	20	14	1,19	0,03571429	0,028	0,145	0,64
	50	44	-	0,01136364	0,013	0,215	1,14
	100	122	-	0,00409836	0,008	0,295	3,34
1000	20	11	0,947	0,04545455	0,079	0,185	0,63
	50	29	0,956	0,01724138	0,011	0,050	1,00
	100	66	0,947	0,00757576	0,003	0,029	2,23
	200	173	0,963	0,00289017	0,001	0,012	8,20
10000	20	11	0,947	0,04545455	0,326	0,620	0,63
	50	26	0,971	0,01923077	0,143	0,312	0,97
	100	52	0,981	0,00961538	0,035	0,135	1,95
	200	106	0,983	0,00471698	0,007	0,043	5,54

TABELA III-10 - DESEMPENHO DO MÉTODO DE CHAUDHARI EM FUNÇÃO DE Br E NX PARA $T = 0,50$, CONSIDERANDO-SE OS MELHORES RESULTADOS PARA CADA CASO (ΔT_o)

Na realidade, ocorre que números de Brenner pequenos correspondem à predominância de transporte dispersivo, de modo que o coeficiente de dispersão numérica, introduzido por Chaudhari, torna-se desprezível, face ao coeficiente de dispersão real. Nesse caso, o método de Chaudhari comporta-se como se fosse tão somente o esquema espacial de diferenças regressivas, não apresentando dispersão numérica.

Outro detalhe importante a ser observado (tabela III-10) é que o aumento do número de Brenner (de 1000 para 10000, por exemplo) exige que se aumente NX, para que os resultados apresentem o mesmo nível de desvios. Nessa situação, ΔT_o tende a se aproximar de ΔT_s .

Uma comparação desses resultados com os dos outros métodos será discutido na alínea d.

c. Método de Laumbach

Para este método foram feitas duas séries de simulações, uma com $R = 1$ e outra com $R = 0,926$, de acordo com os critérios sugeridos no item III.3.3. Os resultados, em termos de Δ_{\max} , $\Sigma\Delta$ e τ , encontram-se, respectivamente nas tabelas III-11 e III-12.

A análise desses resultados mostra três pontos importantes: 1) para $Br = 100$ e $Br = 1000$ os melhores resultados ocorreram para $0,90 < R < 1,0$, ao passo que para $Br = 10000$ eles ocorreram para $R = 1$; 2) números de Brenner grandes exigem malhas de discretização mais finas (maiores NX), para manter o mesmo nível dos desvios Δ_{\max} e $\Sigma\Delta$; e 3) o fato de a diminuição de R, nos casos de $Br = 100$, $Br = 1000$ e $Br = 10000$ ($NX = 200$), ter influenciado bastante em $\Sigma\Delta$ e praticamente não ter afetado Δ_{\max} é indício de que o método apresenta tendência de oscilação no trecho à montante da frente de dispersão, que pode não ser controlável em situações mais complexas.

Br	NX	NT	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	20	10	0,050	0,033	0,249	0,61
	50	25	0,020	0,020	0,326	1,33
	100	50	0,010	0,013	0,392	3,67
1000	20	10	0,050	0,073	0,205	0,61
	50	25	0,020	0,017	0,182	1,33
	100	50	0,010	0,005	0,107	3,67
	200	100	0,005	0,004	0,101	12,58
10000	20	10	0,050	0,013	0,028	0,61
	50	25	0,020	0,056	0,153	1,33
	100	50	0,010	0,040	0,150	3,67
	200	100	0,005	0,009	0,146	12,58

TABELA III-11 - DESEMPENHO DO MÉTODO DE LAUMBACH EM FUNÇÃO DE Br E NX, CONSIDERANDO $R = 1,0$ E $T = 0,50$.

Br	NX	NT	R	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	20	11	0,909	0,04545	0,031	0,165	0,62
	50	27	0,926	0,01852	0,021	0,267	1,39
	100	54	0,926	0,00925	0,014	0,345	3,89
1000	20	11	0,909	0,04545	0,059	0,192	0,62
	50	27	0,926	0,01852	0,011	0,041	1,39
	100	54	0,926	0,00925926	0,003	0,021	3,89
	200	108	0,926	0,00462963	0,003	0,040	13,49
10000	20	11	0,909	0,04545455	0,222	0,712	0,62
	50	26	0,962	0,01923077	0,109	0,480	1,39
	100	53	0,94	0,00943396	0,033	0,196	3,89
	100	52	0,962	0,00961538	0,037	0,168	3,80
	200	108	0,926	0,00463	0,009	0,040	13,49

TABELA III-12 - DESEMPENHO DO MÉTODO DE LAUMBACH EM FUNÇÃO DE Br E NX, CONSIDERANDO $0,90 < R < 1,0$ E $T = 0,50$

d. Comparação Entre os Métodos

A tabela III-13 e os gráficos III-24 a III-26 mostram os melhores resultados obtidos para cada método, considerando-se $NX = 100$ e $T = 0,50$.

Para $Br = 100$ o método de Chaudhari apresentou o melhor desempenho: é o mais acurado e o mais rápido. Deve-se notar que $\Sigma\Delta$ é elevado devido ao grande número de pontos que compõem a frente de dispersão.

A medida que o número de Brenner aumenta, o método das Características passa a ser mais acurado que os métodos de Chaudhari e Laumbach, embora gaste mais tempo de processador. Para números de Brenner altos, ele apresenta o melhor desempenho, uma vez que tanto o método de Chaudhari, quanto o de Laumbach necessitam de discretizações menores (maior NX) para se manter no mesmo nível de desvios.

A grande vantagem do método das Características é que ele não necessita de tentativas para chegar a um bom resultado, apresentando boa acurácia, mesmo para malhas não muito finas. Este método é indicado para números de Brenner altos.

Para as faixas de alta dispersão ($Br < 200$) o método de Chaudhari é mais indicado, uma vez que fornece os menores desvios e o menor tempo de processamento. Admite-se, entretanto, que duas, ou no máximo três simulações bastem para se determinar ΔT_0 .

Br	MÉTODO	ΔT	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma \Delta$	τ (s)
100	Características	0,0050	0,031	0,520	11,44
	Chaudhari	0,0041	0,008	0,295	3,34
	Laumbach	0,0093	0,014	0,345	3,89
1000	Características	0,0100	0,002	0,019	6,16
	Chaudhari	0,0076	0,003	0,029	2,23
	Laumbach	0,0046	0,003	0,040	3,89
10000	Características	0,0100	0,014	0,066	6,16
	Chaudhari	0,0096	0,035	0,135	1,95
	Laumbach	0,0100	0,040	0,150	3,67

TABELA III-13 - MELHORES RESULTADOS OBTIDOS PARA OS MÉTODOS DAS CARACTERÍSTICAS, DE CHAUDHARI E DE LAUMBACH, CONSIDERANDO $NX = 100$ E $T = 0,50$.

III.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS NUMÉRICOS PROPOSTOS - CASO BIDIMENSIONAL

Neste item é apresentada uma comparação, para o caso bidimensional, entre os métodos numéricos de Chaudhari, Laumbach e Características. Foi incluído nesta análise, como base de comparação, o esquema espacial de diferenças centradas implícito (Crank-Nicolson), resolvido por ADIP (Fried, 1975, pg. 253) e que na sequência dos estudos será referido por DCI/ADIP.

À semelhança do caso unidimensional, o número de Brenner será utilizado para definir as características dispersi

vas do processo de transporte de massa, muito embora a equação de dispersão bidimensional simplificada (eq. (II-28)) não se encontre sob a forma adimensional. Neste caso, o número de Brenner (denominado Br_ℓ) é definido com relação à direção principal do tensor dos coeficientes de dispersão (paralelo à direção do vetor velocidade média), sendo dado por:

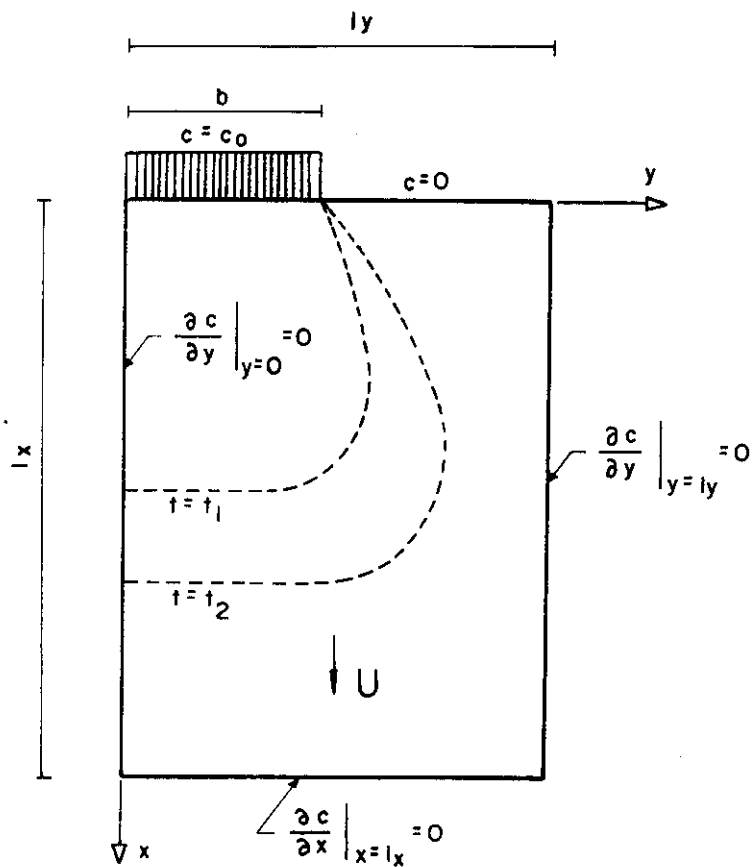
$$Br_\ell = \frac{UL}{D_L} \quad (\text{III-10})$$

onde U é o módulo da velocidade média intersticial, D_L é o coeficiente de dispersão longitudinal e L é a distância entre dois pontos limites da região em estudo, que se situem sobre a mesma direção do vetor velocidade média.

III.4.1 Caso Bidimensional Analisado

O caso bidimensional simplificado, base para as comparações, consiste numa região retangular xy , onde se estabelece um fluxo constante com velocidade U paralela à direção x . Em $x = 0$, sobre um trecho b ao longo da direção y ($0 \leq y < b$), é injetado traçador a uma concentração C_0 . Forma-se, então, uma frente de dispersão que evolui sobre a região de interesse, atingindo um equilíbrio de concentrações após certo tempo. A figura III-6 apresenta o esquema deste caso, com as suas respectivas características físicas.

Este caso é governado pela equação (II-28), sujeita às condições inicial e de contorno dadas por (II-29), cuja solução



Dados numéricos:

$$l_x = 10,0 \text{ cm}$$

$$l_y = 4,2 \text{ cm}$$

$$b = 2,2 \text{ cm}$$

$$\Delta x = 0,4 \text{ cm}$$

$$\Delta y = 0,2 \text{ cm}$$

$$DL = 0,01 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$DT = 0,001 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$U = 0,1 \text{ cm/s}$$

$$c_0 = 1,0$$

FIGURA III-6 — Caso bidimensional simplificado, base para as comparações entre os métodos de Chaudhari, Laumbach, Características e DCI/ADIP (dados numéricos obtidos de Reddell e Sunada, 1970).

analítica, aproximada, foi apresentada por Bruch e Street (1967), como as equações (II-30) a (II-32).

O objetivo das comparações bidimensionais entre as soluções numérica e analítica é verificar a acurácia de cada um dos métodos numéricos para os casos de regime transiente. Para os dados da figura III-6, a frente de dispersão alcança o fim da região em estudo para um tempo $t = 100$ s; para $t = 200$ s já se atingiu o estado estacionário, e as concentrações dentro da área de interesse não variam mais. Deste modo, as comparações serão feitas para os tempos de 10, 30, 50, 70, 90 e 100 s (estado transiente) e 200 s (estado estacionário).

Três séries de simulações serão feitas, envolvendo números de Brenner diferentes: $Br_{\ell_1} = 100$, $Br_{\ell_2} = 1000$ e $Br_{\ell_3} = 10000$. A situação de $Br_{\ell} = 100$ corresponde aos dados originais de Reddell e Sunada (1970). Os dois outros valores do número de Brenner são obtidos pela variação dos coeficientes de dispersão longitudinal e transversal, de modo que a relação D_T/D_L seja constante e igual a 0,1: para $Br_{\ell} = 1000$, $D_L = 0,001$ cm²/s e $D_T = 0,0001$ cm²/s; para $Br_{\ell} = 10000$, $D_L = 0,0001$ cm²/s e $D_T = 0,00001$ cm²/s.

Os critérios de comparação empregados nesta análise são os mesmos descritos no item III.3.2. Para a extensão bidimensional de cada método foi feita uma verificação unidimensional para o caso analisado no item III.3.2.

Com relação à implementação numérica das condições de contorno em $x = 0$, para o caso da figura III-6, Reddell e Sunada (1970) sugerem o seguinte esquema: para $0 \leq y < b$, $c = c_0$; para $y = b$, $c = c_0/2$; e para $b < y \leq l_y$, $c = 0$.

III.4.2 O Desempenho do Método de Laumbach

O esquema bidimensional proposto por Laumbach (1975, eq. (II-21)) não apresentou bons resultados. Não foi possível, com esse esquema, simular o caso unidimensional onde $Br = 877,7$, $NX = 48$ e $\Delta T = 0,0192$. O principal problema está relacionado com o critério de convergência, desconhecido, que exige intervalos de tempo muito pequenos (verificação empírica). Este esquema pode ser resolvido de dois modos diferentes: diretamente e por meio da técnica ADIP.

Na solução direta a equação discretizada bidimensional de Laumbach é posta sob a forma:

$$\begin{aligned} a_1 C_{i,j-1}^{n+1} + a_2 C_{i-1,j}^{n+1} + a_3 C_{i,j}^{n+1} + a_4 C_{i+1,j}^{n+1} + a_5 C_{i,j+1}^{n+1} = \\ = b_1 C_{i,j-1}^n + b_2 C_{i-1,j}^n + b_3 C_{i,j}^n + b_4 C_{i+1,j}^n + b_5 C_{i,j+1}^n \end{aligned}$$

(III-11)

onde a_i e b_i são coeficientes e $C_{i,j}^n$ é a concentração da célula (i,j) no tempo n . Escrevendo esta equação, com cinco incógnitas, para cada célula, obtêm-se um sistema de equações que se apre-

senta sob a forma de uma matriz banda com cinco diagonais. Este sistema é resolvido pelo processo de eliminação de Gauss, através de um algoritmo chamado "band solve" desenvolvido por Thurnau (1963) e implementado por Reddell e Sunada (1970). A principal deficiência desta solução é o tempo de processamento que se torna muito grande, à medida que se precisa de menores intervalos de tempo para se tentar alcançar a convergência do método. Isto ficou claro, quando se procedeu à verificação do esquema bidimensional com dados unidimensionais ($Br = 877,7$, $NX = 48$ e $\Delta t = 250$ s), que forneceram bons resultados na análise unidimensional (item III.3). O esquema bidimensional não alcançou convergência sequer com $\Delta t = 16,25$ s, tendo gasto um tempo de processamento aproximadamente vinte e cinco vezes maior que o dispendido pelos outros métodos nas suas respectivas verificações.

A solução por meio da técnica ADIP possibilita uma boa economia de tempo de processamento, mas não é suficiente para eliminar os problemas de oscilação. A verificação para os dados unidimensionais ($Br = 877,7$ e $NX = 48$) foi feita considerando-se diversos valores para Δt , conforme tabela III-14. Todas as situações apresentaram oscilações, conforme previsto no item III.3.4, sendo que as mesmas diminuem, à medida que se diminui Δt . O gráfico III-27 apresenta uma simulação com $\Delta t = 100$ s e outra com $\Delta t = 16,25$ s, considerando $t = 6.500$ s ($T = 0,50$), onde nota-se que o decréscimo das oscilações com relação a Δt é pequeno.

NT	Δt (s)	C_{\min}	C_{\max}
26	250	0,711	1,465
65	100	0,958	1,168
104	62,5	0,955	1,127
200	32,5	0,968	1,100
400	16,25	0,974	1,089

TABELA III-14 - AMPLITUDE DAS OSCILAÇÕES VERIFICADAS NO TRECHO DE MONTANTE DA FRENTE DE DISPERSÃO, PARA O ESQUEMA BIDIMENSIONAL DE LAUMBACH NO TESTE UNIDIMENSIONAL ($Br = 877,7$, $\Delta x = 3,81$ E $NX = 48$), PARA O TEMPO $t = 6500$ s ($T = 0,50$).

Esse comportamento irregular do método de Laumbach é suficiente para inviabilizar a sua aplicação, de modo que este método foi excluído das comparações que se seguem.

III.4.3 Comparação para $Br_0 = 100$

Os resultados obtidos para os métodos numéricos de Chaudhari, DCI/ADIP e Características estão apresentados sob três formas diferentes: 1) os gráficos III-32 a III-40 mostram os perfis de dispersão longitudinal, concentração versus distância

cia, para os tempos de 50, 100 e 200 s; 2) a tabela III-15 apresenta um resumo dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ obtidos para os tempos de 10, 30, 50, 70, 90, 100 e 200 s, considerando-se diferentes intervalos de tempo (Δt); e 3) nos gráficos III-28 e III-29 encontram-se, respectivamente, as curvas dos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ em função do tempo t , para o intervalo de tempo $\Delta t = 2,778\text{s}$: (intervalo de tempo ótimo obtido para o método de Chaudhari).

Esses resultados evidenciam, claramente, um melhor desempenho do método de Chaudhari, para estados transientes. É interessante notar que o método DCI/ADIP, afora uma pequena tendência de oscilação (estados transiente), apresentou um comportamento muito bom, principalmente no estado estacionário.

O comportamento desses métodos, com relação aos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$, é o mesmo apresentado para o caso unidimensional: diminuições de Δt levam a uma melhora na acurácia. Para os métodos das Características e DCI/ADIP, ao passo que o método de Chaudhari continua a apresentar um Δt ótimo, que ocorreu para $\Delta t_0 = 2,778\text{ s}$.

A tabela III-15 mostra que $\Delta_{\text{máx}}$ diminui à medida que a frente de dispersão evolui, atingindo praticamente um patamar para $t \geq 50\text{ s}$. Para os métodos de Chaudhari e Características, o $\Delta_{\text{máx}}$ ocorre junto à fronteira em $x = 0$ e próximo a $y = 2,2\text{ cm}$ (forte descontinuidade do perfil transversal de concentração - V. gráficos III-33 e III-34). Para o método DCI/ADIP o $\Delta_{\text{máx}}$ ocorre próximo ao ponto de 50% de concentração das curvas de dispersão longitudinal ($y < 2,2\text{ cm}$), conforme o gráfico III-32.

	ΔT (s)	Δ _{máx}							ΣΔ						
		T E M P O (s)													
		10	30	50	70	90	100	200	10	30	50	70	90	100	200
DCI/ADIP DFX = 0,0	2,778			0,058			0,043	0,026			4,574			3,183	0,828
	2,0	0,091	0,065	0,053	0,046	0,042	0,040	0,026	2,843	3,759	4,220	4,174	3,394	2,935	0,828
	1,0	0,089	0,061	0,050	0,043	0,039	0,026	0,026	2,796	3,541	3,942	3,905	3,146	1,811	0,828
	0,5	0,089	0,060	0,049	0,042	0,038	0,026	0,026	2,784	3,496	3,874	3,841	3,085	1,782	0,829
CARACTERÍSTICAS PX = 2 DFX = 0,5	5,0	0,147	0,081	0,081	0,081	0,081	0,081	0,071	3,204	3,769	4,196	4,546	4,331	3,437	2,079
	2,778			0,050			0,050	0,060			2,746			2,052	1,866
	2,0	0,097	0,057	0,046	0,046	0,046	0,046	0,046	2,260	2,598	2,839	3,045	2,788	1,951	1,393
	1,0	0,091	0,055	0,043	0,043	0,043	0,043	0,034	2,231	2,521	2,737	2,919	2,607	1,794	1,000
	0,5	0,081	0,047	0,038	0,037	0,037	0,037	0,029	1,876	2,106	2,285	2,422	2,126	1,408	0,834
CHAUDHARI DFX = 0,5	3,125			0,242			4,321	-			9,412			228,0	-
	2,941			0,041			0,051	0,041			2,934			2,401	1,291
	2,778			0,041			0,041	0,041			2,586			1,934	1,302
	2,632			0,041			0,042	0,042			2,649			1,987	1,300
	2,5	0,066	0,042	0,042	0,042	0,042	0,042	0,042	2,289	2,579	2,809	2,983	2,337	2,091	1,301
	2,0	0,094	0,051	0,042	0,042	0,042	0,042	0,042	2,977	3,310	3,549	3,727	3,281	2,609	1,304
	1,0	0,159	0,104	0,084	0,072	0,064	0,062	0,043	4,658	5,215	5,506	5,661	5,274	3,856	1,330
	0,5	0,191	0,129	0,104	0,090	0,080	0,077	0,044	5,632	6,314	6,646	6,771	6,267	4,586	1,350
CHAUDHARI DFX = 0,0	2,5	0,156	0,089	0,070	0,059	0,053	0,049	0,024	4,046	4,063	4,247	4,402	3,943	2,686	0,930
	2,0	0,102	0,055	0,044	0,037	0,030	0,030	0,025	2,946	3,078	3,248	3,436	2,874	2,094	0,904
	1,0	0,062	0,031	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	1,849	1,990	2,144	2,208	1,462	1,348	0,858
	0,5	0,058	0,037	0,030	0,026	0,026	0,026	0,026	2,095	2,671	2,897	2,939	2,260	1,983	0,843

TABELA III-15 - VALORES DOS DESVIOS $\Delta_{\text{máx}}$ E $\Sigma \Delta$ EM FUNÇÃO DO TEMPO, PARA CADA MÉTODO, CONSIDERANDO $Br_L = 100$ E DIFERENTES INTERVALOS DE TEMPO

A situação de maiores desvios, maior $\Sigma\Delta$, ocorre para $t = 70$ s, onde a frente de dispersão acha-se mais desenvolvida (V.Tabela III-15).

A análise dos gráficos III-28 e III-29 mostra que o método de Chaudhari é o mais acurado, para o estado transiente, seguindo-se a ele os métodos das Características e DCI/ADIP. Por outro lado, à medida que se aproxima o estado estacionário, o método DCI/ADIP passa a apresentar resultados mais acurados, suplantando o método de Chaudhari ($t = 200$ s). Este fato é importante, pois mostra que verificações de acurácia de métodos numéricos feitas para o estado estacionário podem não ser conclusivas.

Devido às condições de contorno (fig. III-6), há uma forte descontinuidade inicial do perfil transversal de concentração em $y = 2,2$ cm, que faz com que a região crítica de ajuste se situe em torno de $y = 2,2$ cm. Nesse sentido, nota-se nos gráficos III-32 a III-40, que o ajuste dos pontos numéricos é pior para $y = 2,0$ cm e $y = 2,4$ cm, principalmente no trecho inicial, onde ainda há forte influência das condições de contorno. No estado transiente ($t < 100$ s) os trechos descendentes das curvas de dispersão longitudinal são simulados com maior acurácia que os trechos de ascensão.

O gráfico III-32 mostra que o método DCI/ADIP, para $t = 50$ s, apresenta pequenas oscilações para as curvas de $y \leq 2,0$ cm. Nota-se, também, um leve amortecimento da solução numérica nos trechos finais das curvas de dispersão. Dentre os três métodos numéricos, DCI/ADIP é o que consegue melhor des-

crever os trechos iniciais das curvas de dispersão.

O método das Características apresenta um bom desempenho (gráficos III-34, III-37 e III-40). Ele consegue descrever relativamente bem as curvas de dispersão, principalmente os trechos descendentes para $y > 2,2$ cm. Entretanto é o que apresenta os maiores erros nos trechos iniciais.

O método de Chaudhari apresentou, no geral, os melhores resultados. Para $T = 50$ s (gráfico III-33) ele apresenta um comportamento contrário à dispersão numérica: o gradiente de concentração dos pontos numéricos é bem maior que o da solução analítica.

Um outro ponto a se considerar é o tempo de processamento. Para as mesmas condições, o método de Chaudhari é mais rápido, seguindo-se a ele os métodos DCI/ADIP e Características. A relação aproximada entre os tempos de processamento é, respectivamente, 1 : 3 : 9.

O método de Chaudhari apresenta como desvantagem o fato de que não há possibilidade de se atingir uma acurácia maior, ao passo que para os outros dois métodos basta diminuir o intervalo de tempo Δt (V. tabela III-15).

Com o intuito de melhorar a acurácia do método de Chaudhari, introduziu-se modificações de modo a se simular com maior realidade as condições de contorno em $x = 0$, conforme figura III-7. Os resultados obtidos, como seria de se esperar,

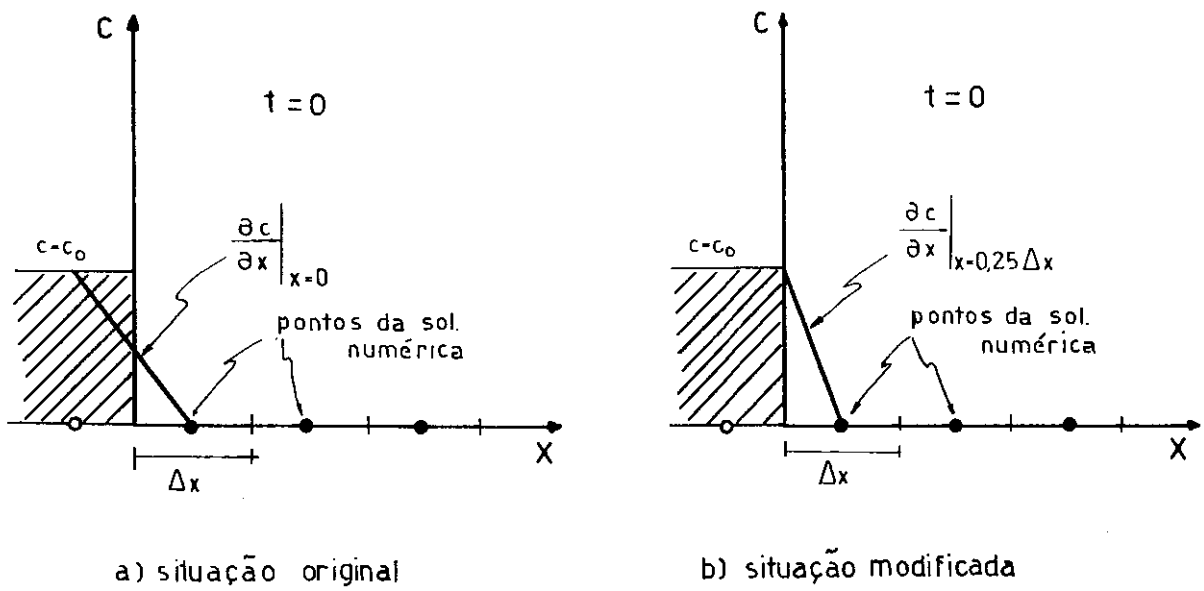


FIGURA III-7 Formas de implementar condições de contorno em $x=0$, para o esquema numérico

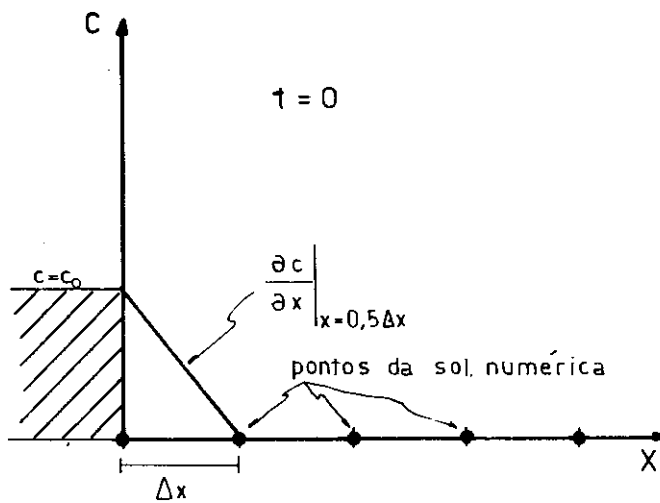


FIGURA III-8 Efeito da defasagem dos pontos de cálculo da solução numérica na representação das condições de contorno em $x=0$

melhoraram.

Verificou-se, por outro lado, que uma simples defasagem ($0,5 \Delta x$) dos pontos onde se calcula a solução numérica (fig. III-8), fornece resultados tão bons quanto a situação modificada (tabela III-15). Para identificar essas duas situações, definiu-se um parâmetro DFX, tal que para $DFX = 0,5$ a solução numérica é calculada no meio do intervalo (fig. III-7.a) e para $DFX = 1,0$ ela é calculada no fim do intervalo (fig. III-8).

Tendo em vista que no caso geral é mais difícil estabelecer condições particulares para simular as condições de contorno, optou-se por fazer uma análise mais detalhada para o caso onde $DFX = 1,0$. Nesta situação, o melhor resultado ocorreu para $\Delta t = 1,0$ s. Nos gráficos III-30 e III-31 estão apresentados, respectivamente, os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma \Delta$ versus t , relativos aos três métodos, para $\Delta t = 1,0$ s. Observa-se que o método de Chaudhari apresenta os melhores resultados, embora no estado estacionário seus resultados sejam equivalentes aos do método DCI/ADIP.

Entretanto, o método de Chaudhari ainda apresenta dois problemas não resolvidos: primeiro, não foi possível determinar nenhuma relação para prever o Δt ótimo. Sabe-se, a partir do estudo unidimensional, que para números de Brenner baixos, ele ocorre próximo a $\Delta t_{\text{máx}}$; segundo, não há nenhuma equação que possa, rigorosamente, determinar o $\Delta t_{\text{máx}}$. Para os objetivos deste estudo, ele foi determinado pela equação aproximada,

$$\frac{U^2}{2(\Delta x)^2} \cdot (\Delta t_{\text{máx}})^2 + \left[\frac{D_L}{(\Delta x)^2} + \frac{U}{2\Delta x} \right] \cdot \Delta t_{\text{máx}} - 1 = 0 \quad (\text{III-12})$$

onde se considera apenas a raiz positiva, Observa-se que, no caso $DFX = 0,5$, as conclusões obtidas na análise unidimensional continuam válidos ($\Delta t_o \approx \Delta t_{\text{máx}}$) ao passo que para $DFX = 1,0$ estas conclusões não mais se verificam ($\Delta t_o \ll \Delta t_{\text{máx}}$).

Essas dificuldades passam a desestimular o emprego do método de Chaudhari, apesar de ser mais acurado e mais rápido que os outros métodos (desde que se determine o Δt_o).

Deste modo, o método das Características parece ser o mais recomendável, para valores de número de Brenner da ordem de 100, apesar do tempo de processamento ser maior, devido ao menor grau de incertezas quanto ao seu comportamento.

III.4.4 Comparação para $Br_\ell = 1.000$

Os resultados obtidos para $Br_\ell = 1.000$ estão apresentados nos gráficos III-41 a III-46, para os tempos $t = 50$ s e $t = 100$ s.

Nesta situação, o processo de transporte de massa é acentuadamente convectivo, fazendo com que os métodos de Chaudhari e DCI/ADIP apresentem problemas. Os dois métodos passam a oscilar, sendo que as amplitudes são menores para o método

do de Chaudhari. Como as oscilações ou dispersões numéricas são facilmente identificadas por simples inspeção visual, não se levou em consideração análises quanto aos desvios $\Delta_{\text{máx}}$ ou $\Sigma\Delta$.

Para a situação de Δt ótimo, o método de Chaudhari não apresenta oscilações, mas, por outro lado, os pontos numéricos não conseguem representar bem a frente de dispersão, havendo uma descontinuidade acentuada no perfil de dispersão (gráficos III-42 e III-45). Na tabela III-16 encontram-se os valores máximos e mínimos das oscilações que se verificaram no trecho de montante ($c = 1,0$) da frente de dispersão, em função de diferentes intervalos de tempo. Considerando-se $DFX = 0,5$, o melhor resultado ocorreu para $\Delta t = 3,846$ s, valor muito próximo de $\Delta t_{\text{máx}}$.

TEMPO (s)		50		100		200	
NT	Δt (s)	MIN	MÁX	MIN	MÁX	MIN	MÁX
400	0,5	0,951	1,136	0,934	1,154	0,997	1,004
200	1,0	0,966	1,116	0,947	1,142	1,000	1,000
100	2,0	0,980	1,100	0,973	1,101	1,000	1,000
80	2,5	0,989	1,079	0,982	1,092	1,000	1,000
60	3,3	0,997	1,042	0,996	1,043	1,000	1,000
52	3,846	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
48	4,167	0,010	2,156	-	-	-	-

TABELA III-16 - VERIFICAÇÃO DO NÍVEL DE OSCILAÇÕES, PARA $Br_\ell = 1000$, SEGUNDO DIFERENTES INTERVALOS DE TEMPO, PARA O MÉTODO DE CHAUDHARI. OS VALORES INDICADOS CORRESPONDEM ÀS CONCENTRAÇÕES MÁXIMAS E MÍNIMAS OBTIDAS ($DFX = 0,5$)

O método DCI/ADIP apresenta oscilações e dispersão numérica (gráficos III-41 e III-44), que se verificam mesmo para o estado estacionário, conforme mostra a tabela III-17. Observa-se que a redução de Δt pouco melhora as oscilações: para $\Delta t = 3,33$ s a amplitude é de 0,261, reduzindo para 0,203 para $\Delta t = 0,5$ s.

TEMPO (s)		50		100		200	
NT	Δt (s)	MIN	MÁX	MIN	MÁX	MIN	MÁX
400	0,5	0,932	1,155	0,919	1,164	0,970	1,018
200	1,0	0,930	1,159	0,920	1,164	0,971	1,020
100	2,0	0,926	1,167	0,913	1,172	0,975	1,026
80	2,5	0,924	1,173	0,907	1,179	0,973	1,028
60	3,3	0,921	1,182	0,898	1,191	0,970	1,042

TABELA III-17 - VERIFICAÇÃO DO NÍVEL DE OSCILAÇÕES, PARA $Br_g = 1,000$, SEGUNDO DIFERENTES INTERVALOS DE TEMPO, PARA O MÉTODO DCI/ADIP. OS VALORES INDICADOS CORRESPONDEM ÀS CONCENTRAÇÕES MÁXIMAS E MÍNIMAS OBTIDAS

Indiscutivelmente, o método das Características apresenta os melhores resultados: não oscila e não tem dispersão numérica (gráficos III-43 e III-46). Este método apresenta como vantagem adicional o fato de $\Delta t_{\text{máx}}$ crescer, à medida que o número de Brenner cresce, ao contrário dos outros dois métodos.

Há, entretanto, uma restrição: o uso de $\Delta t \approx \Delta t_{\text{máx}}$ pode levar a uma simulação imperfeita da dispersão transversal, subestimando-a. Isto é explicado pelo fato de a frente deslocar-se muito depressa, nessa situação, não dando margem a que se estabeleça um fluxo contínuo de transporte de massa transversal (efeito do uso de diferenças finitas para simular dispersão transversal).

Deve-se observar que as soluções numéricas obtidas, pelos três métodos, para $y = 2,0$ e $y = 2,4$, apresentam um comportamento semelhante: os resultados para $y = 2,0$ cm estão subestimados, ao passo que para $y = 2,4$ eles estão sobrestimados. Isto caracteriza uma dispersão numérica transversal.

Este problema, típico do método de diferenças finitas, aparece no método das Características devido ao seu procedimento de cálculo que utiliza o método de diferenças finitas para o cálculo do transporte dispersivo. Caso houvesse a componente v de velocidade (fluxo bidimensional), essa dispersão numérica transversal seria, provavelmente, atenuada, uma vez que o transporte de massa transversal não seria devido só à dispersão transversal.

III.4.5 Comparação para $Br_\ell = 10.000$

Para $Br_\ell = 10.000$, o transporte de massa ocorre, praticamente, só sob a forma convectiva. A pequena dispersão longitudinal que pode ocorrer não é perceptível dentro da malha de

discretização considerada.

Nessas condições, os problemas apresentados pelos métodos DCI/ADIP e Chaudhari, para $Br_\ell = 1.000$, acentuam-se, tornando inviável o seu uso para números de Brenner altos. As tabelas III-18 e III-19 mostram os valores máximos e mínimos das oscilações, em função de diferentes intervalos de tempo, respectivamente, para os métodos de Chaudhari e DCI/ADIP.

TEMPO (s)		50		100		200	
NT	Δt (s)	MIN	MÁX	MIN	MÁX	MIN	MÁX
200	1,0	0,951	1,150	0,915	1,192	0,991	1,006
100	2,0	0,968	1,134	0,951	1,149	0,998	1,004
80	2,5	0,980	1,112	0,963	1,145	0,999	1,001
60	3,3	0,992	1,087	0,985	1,109	1,000	1,000
52	3,846	0,999	1,046	0,998	1,058	1,000	1,000
48	4,167	-0,113	2,793	-	-	-	-

TABELA III-18 - VERIFICAÇÃO DO NÍVEL DE OSCILAÇÕES, PARA $Br_\ell = 10.000$, SEGUNDO DIFERENTES INTERVALOS DE TEMPO, PARA O MÉTODO DE CHAUDHARI. OS VALORES INDICADOS CORRESPONDEM ÀS CONCENTRAÇÕES MÁXIMAS E MÍNIMAS OBSERVADAS ($DFX = 0,5$).

TEMPO (s)		50		100		200	
NT	Δt (s)	MIN	MÁX	MIN	MÁX	MIN	MÁX
400	0,5	0,903	1,194	0,873	1,217	0,905	1,083
200	1,0	0,902	1,197	0,875	1,217	0,908	1,087
100	2,0	0,897	1,205	0,870	1,215	0,927	1,101
80	2,5	0,895	1,210	0,862	1,227	0,918	1,104
60	3,3	0,894	1,218	0,853	1,239	0,914	1,103

TABELA III-19 - VERIFICAÇÃO DO NÍVEL DE OSCILAÇÕES, PARA $Br_\lambda = 10.000$, SEGUNDO DIFERENTES INTERVALOS DE TEMPO, PARA O MÉTODO DCI/ADIP.

Os gráficos III-47 e III-48 apresentam os melhores resultados obtidos, para os três métodos, para os tempos $t = 50$ s e $t = 100$ s. Cada método foi simulado com diferentes Δt , sendo ele dado por 0,5 s, 3,846 s, e 50 s, respectivamente, para os métodos DCI/ADIP, Chaudhari e Características. Fica nítida, aqui, a vantagem do método das Características na utilização de Δt maiores, gastando menos tempo de processamento.

Caso houvesse interesse em melhorar a acurácia dos métodos DCI/ADIP e Chaudhari, seria necessário diminuir muito os intervalos espaciais Δx e, em consequência, também os intervalos de tempo Δt .

Em vista desses resultados, o método das Características mostra-se mais adequado para tratar problemas de dispersão onde o número de Brenner é grande ($Br_\lambda > 1000$) e o transporte

de massa é predominantemente convectivo, pois ele não oscila, representa bem a frente de dispersão e é rápido em termos de execução. Apresenta, entretanto, problemas de dispersão numérica transversal, quando há gradientes elevados de concentração na direção transversal ao fluxo (problema comum aos três métodos), devido ao uso da metodologia de diferenças finitas para simular o transporte dispersivo. Futuros estudos devem incluir uma análise mais detalhada desse problema, de modo a se melhorar a efi-ciência do método.

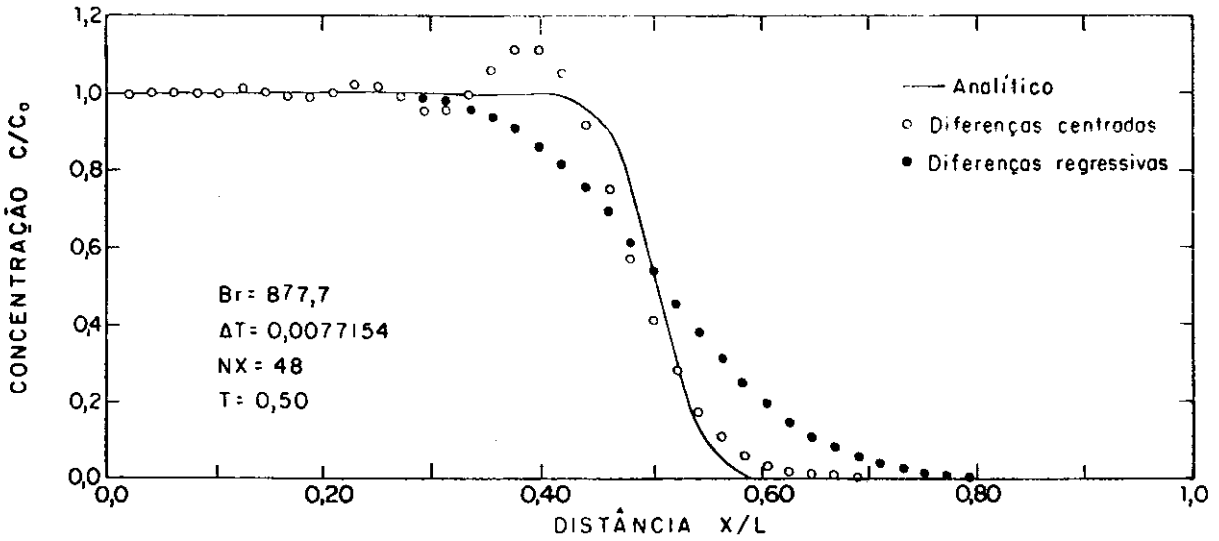


GRÁFICO III-1 : Problemas típicos dos métodos numéricos oscilação e amortecimento.

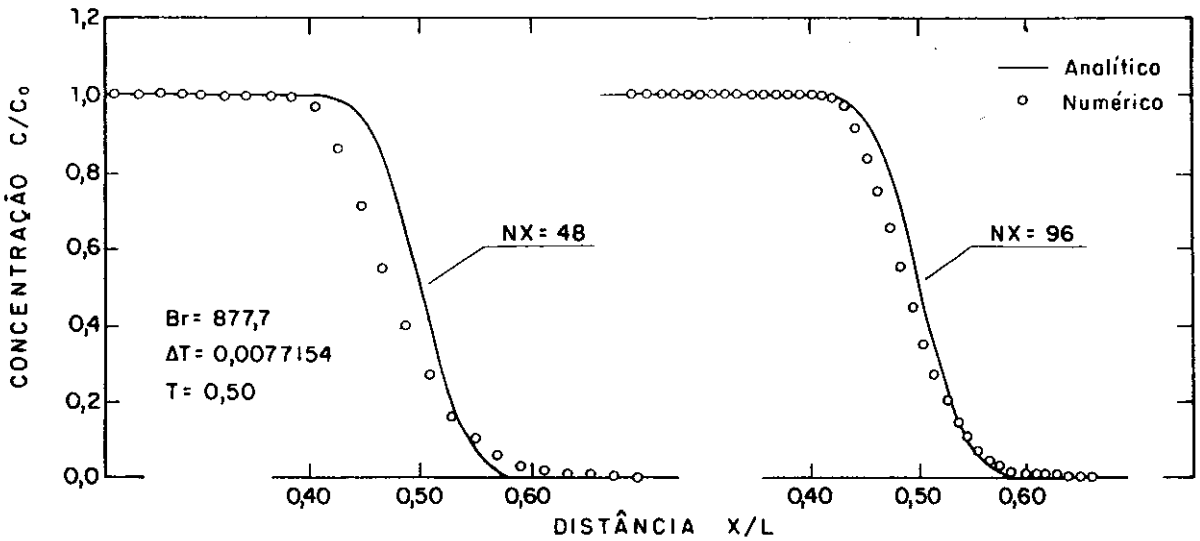


GRÁFICO III-2 : Resultados numéricos para o método de Peaceman e Rochford.

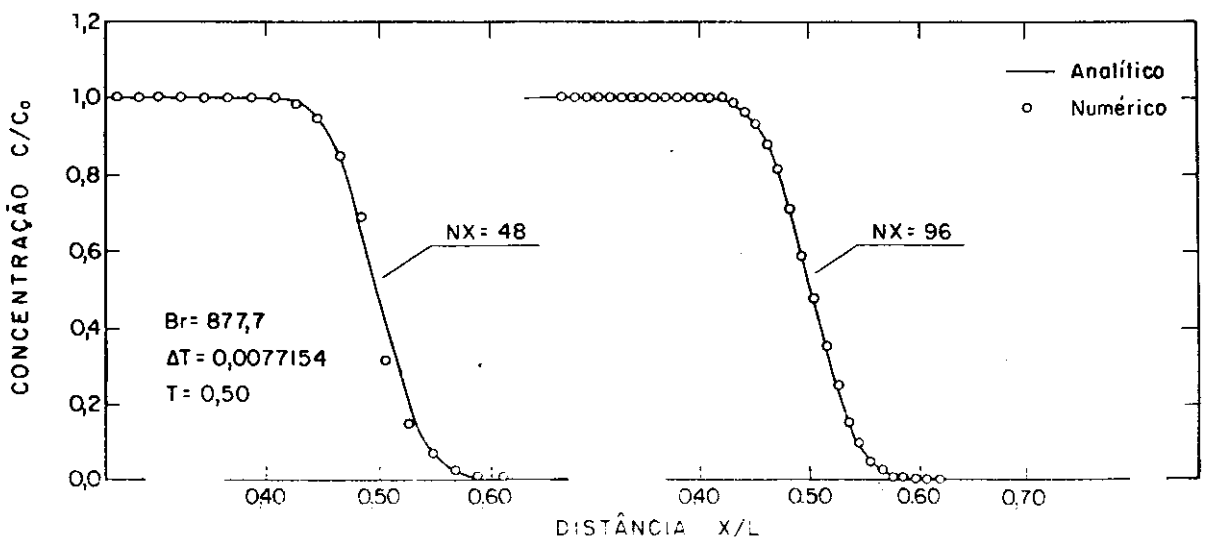


GRÁFICO III-3 : Resultados numéricos para o método Características.

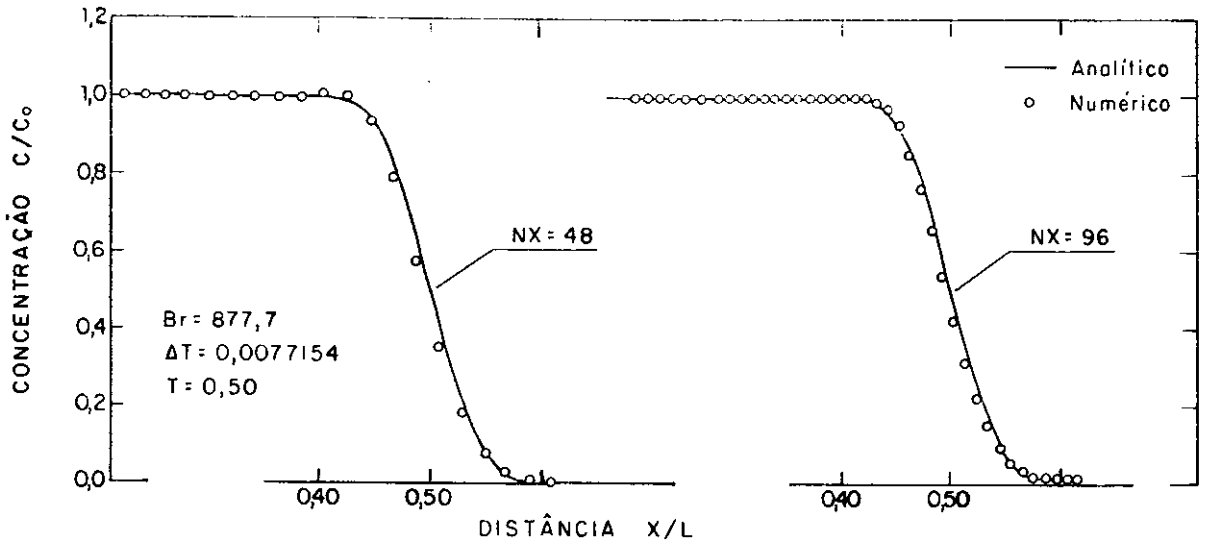


GRÁFICO III-4 : Resultados numéricos para o método de Stone-Brian-Price.

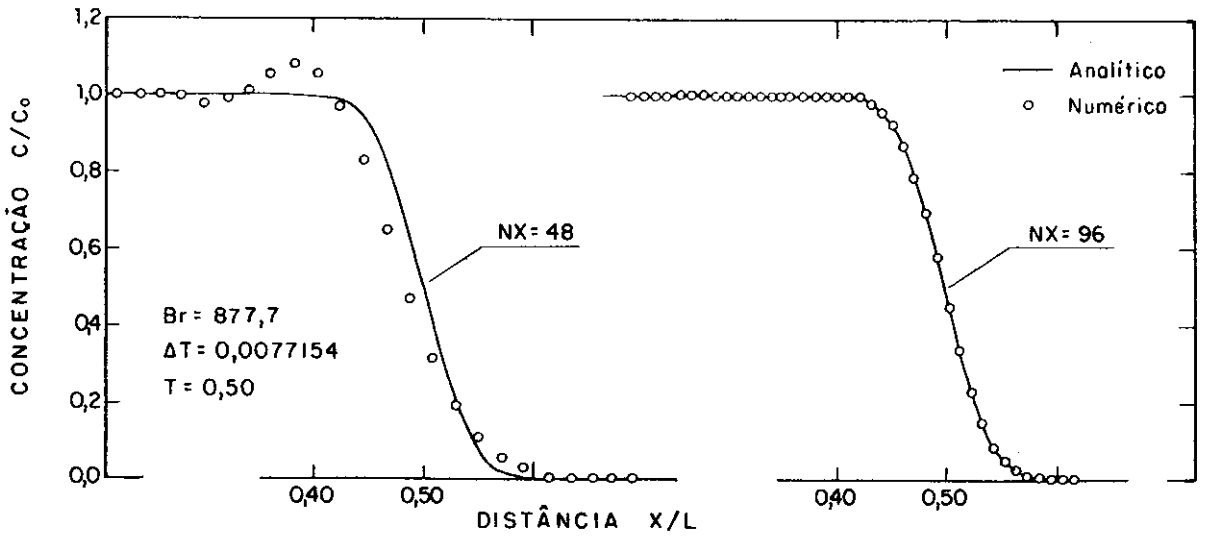


GRÁFICO III-5 : Resultados numéricos para o método de Chaudhari.

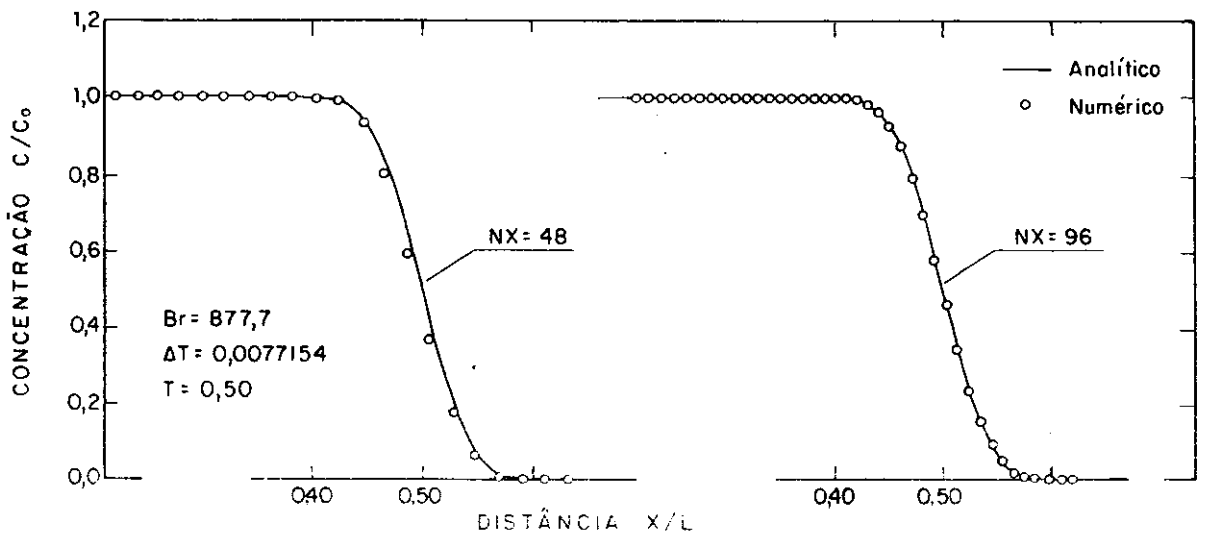


GRÁFICO III-6 : Resultados numéricos para o método de Laumbach.

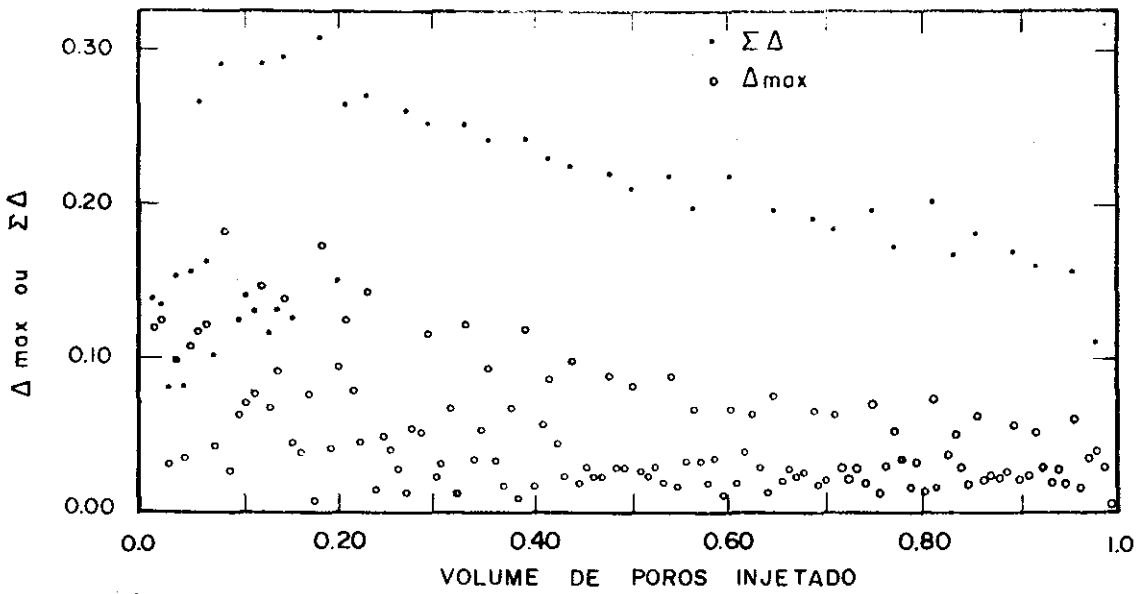


GRÁFICO III-7 : Método das Características - Variação dos Erros
(Br= 877.7 , Nx= 48 , $\Delta T= 0.0077154$)

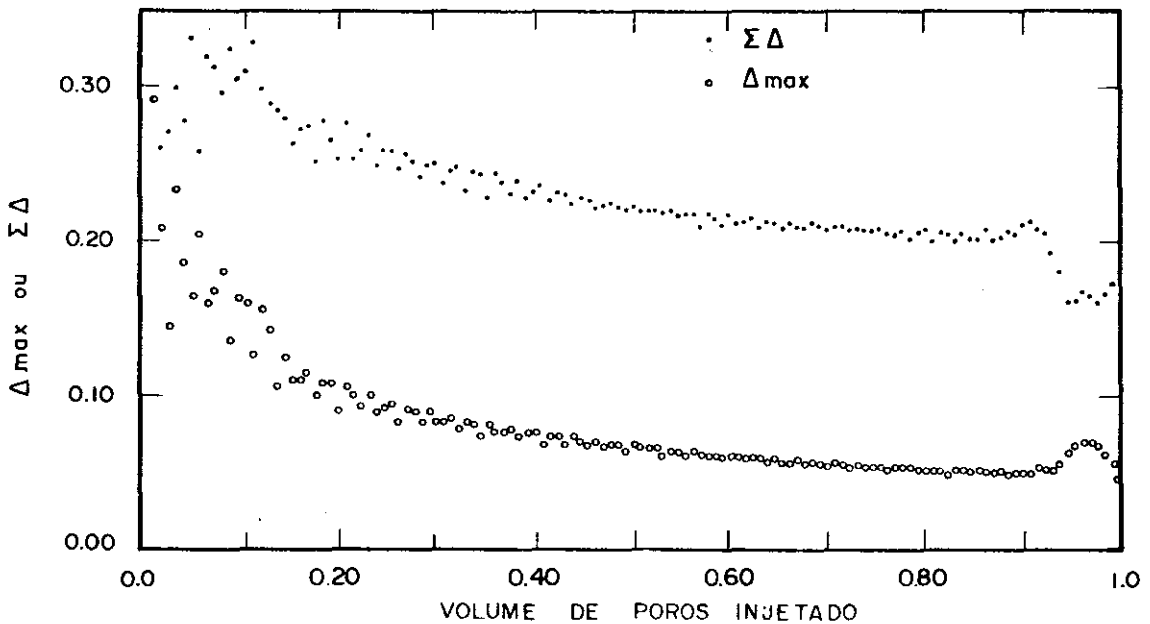


GRÁFICO III-8 : Método de Stone-Brian-Price - Variação dos Erros
(Br= 877.7 , Nx= 48 , $\Delta T= 0.0077154$)

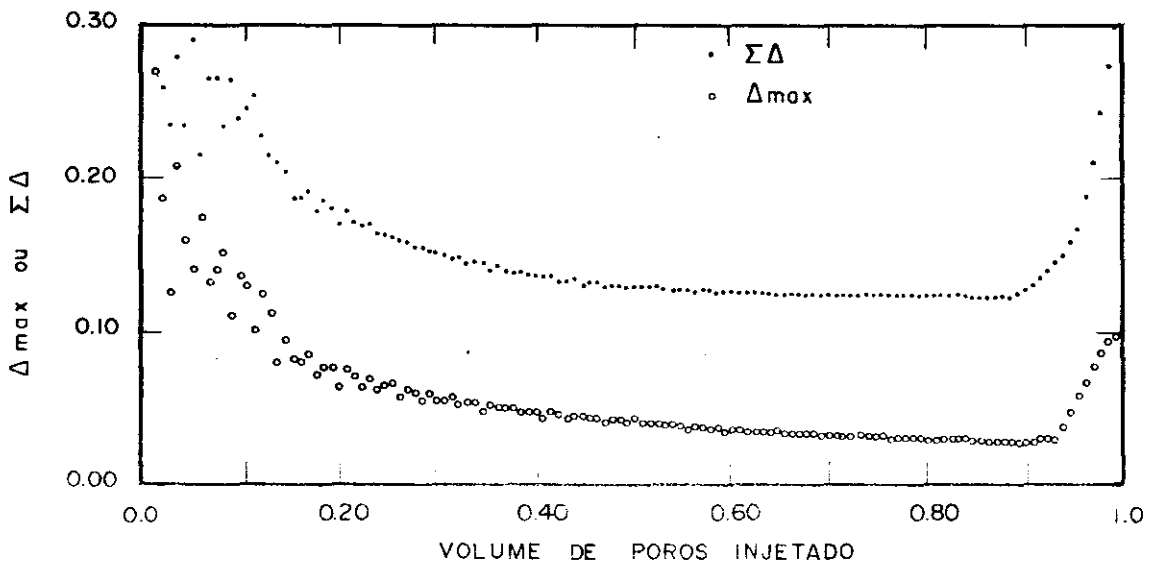
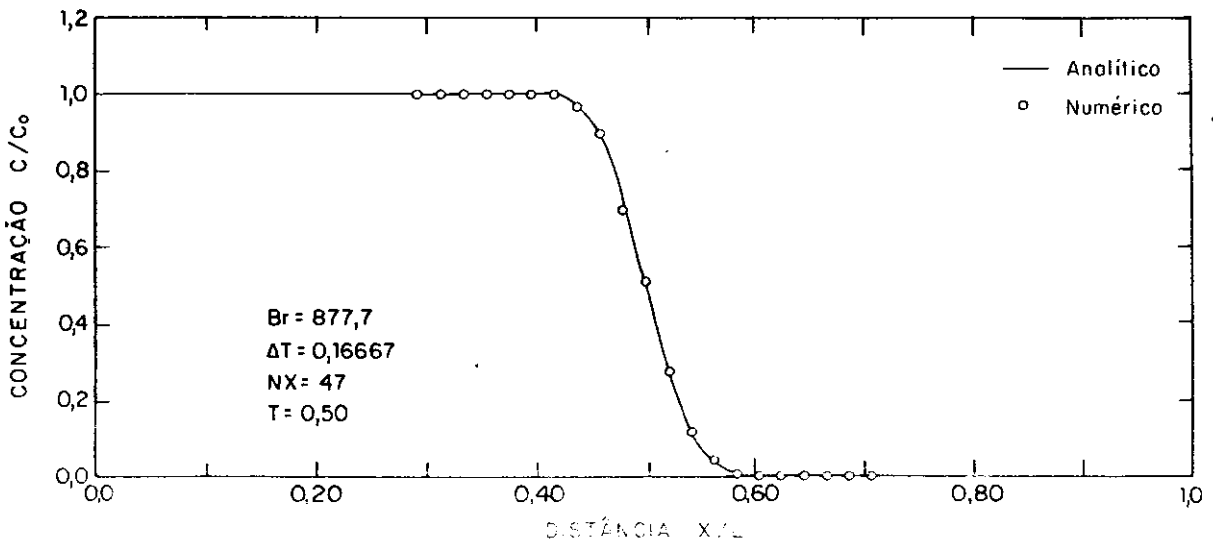
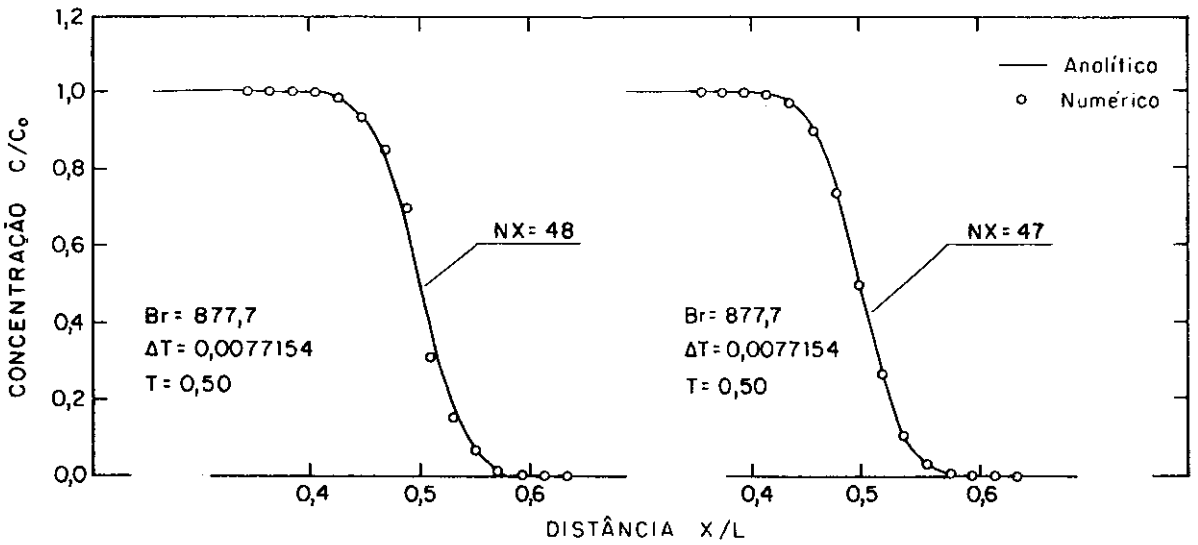
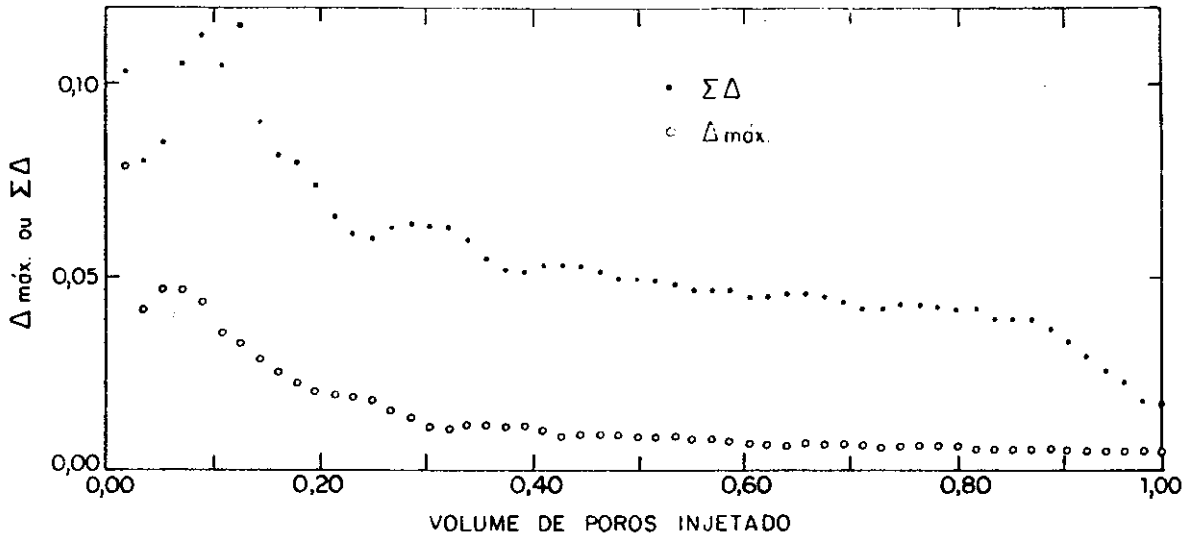


GRÁFICO III-9 : Método de Laumbach - Variação dos Erros
(Br= 877.7 , Nx= 48 , $\Delta T= 0.0077154$)



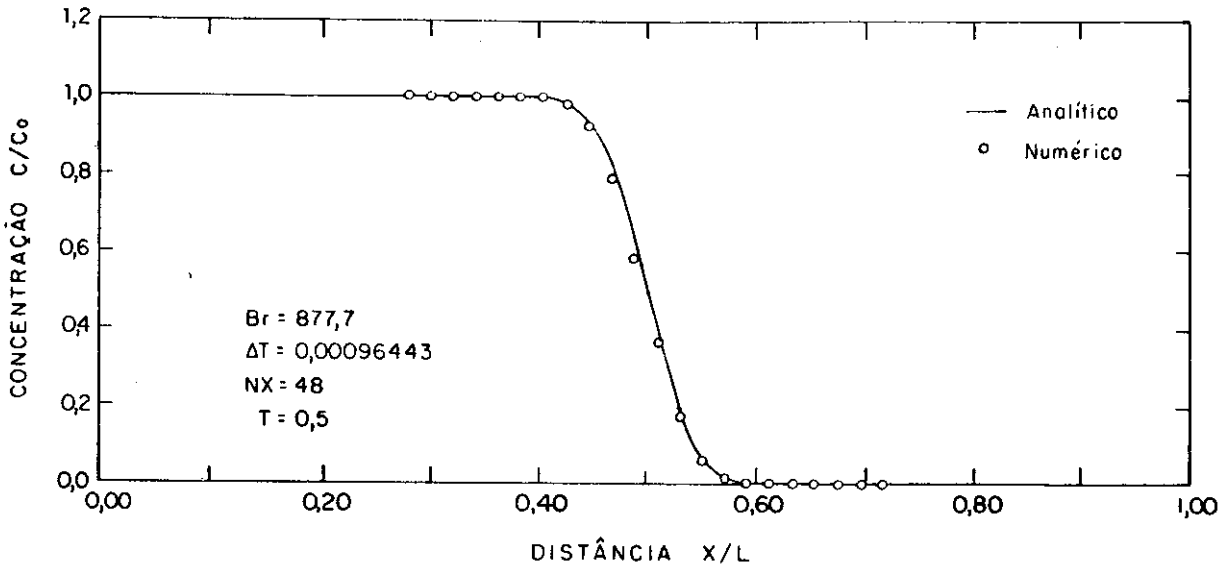


GRÁFICO III-13 : Melhor resultado obtido para o método de Stone-Brian-Price.

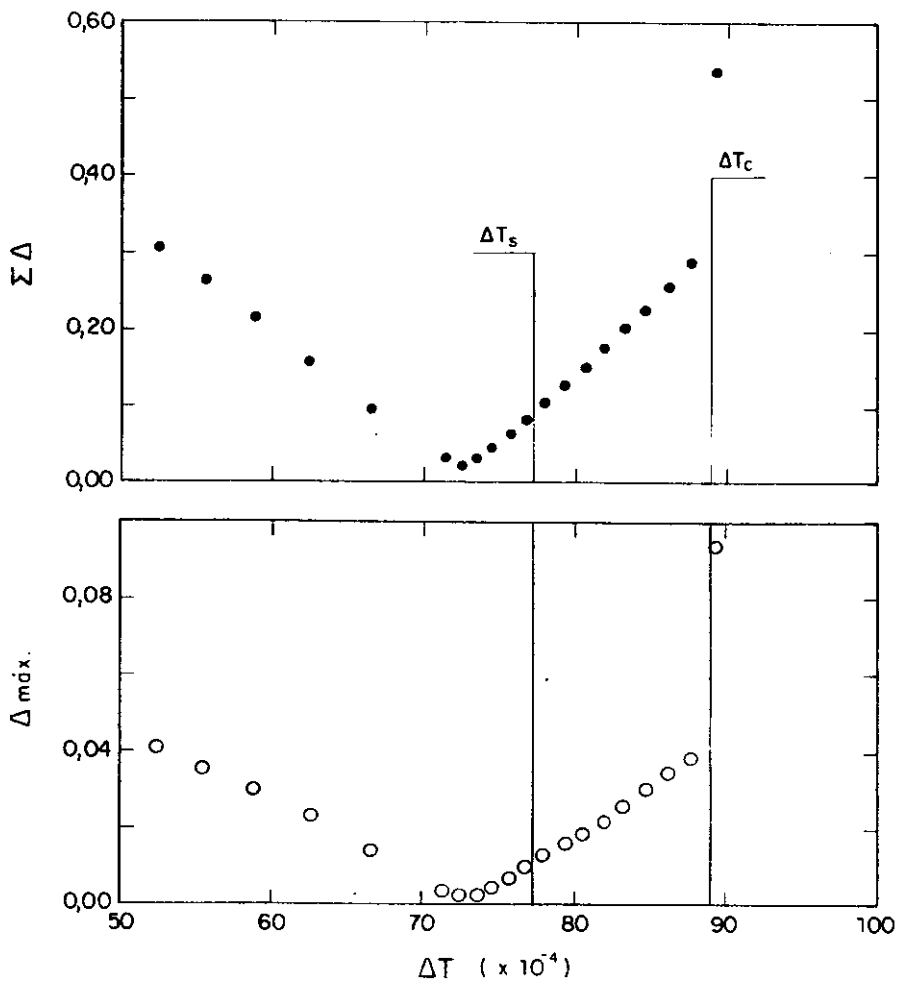


GRÁFICO III-14 : Método de Chaudhari - Influência do intervalo de tempo nos erros Δm_{\max} e $\Sigma \Delta$ para NX=100 e Br= 877,7.

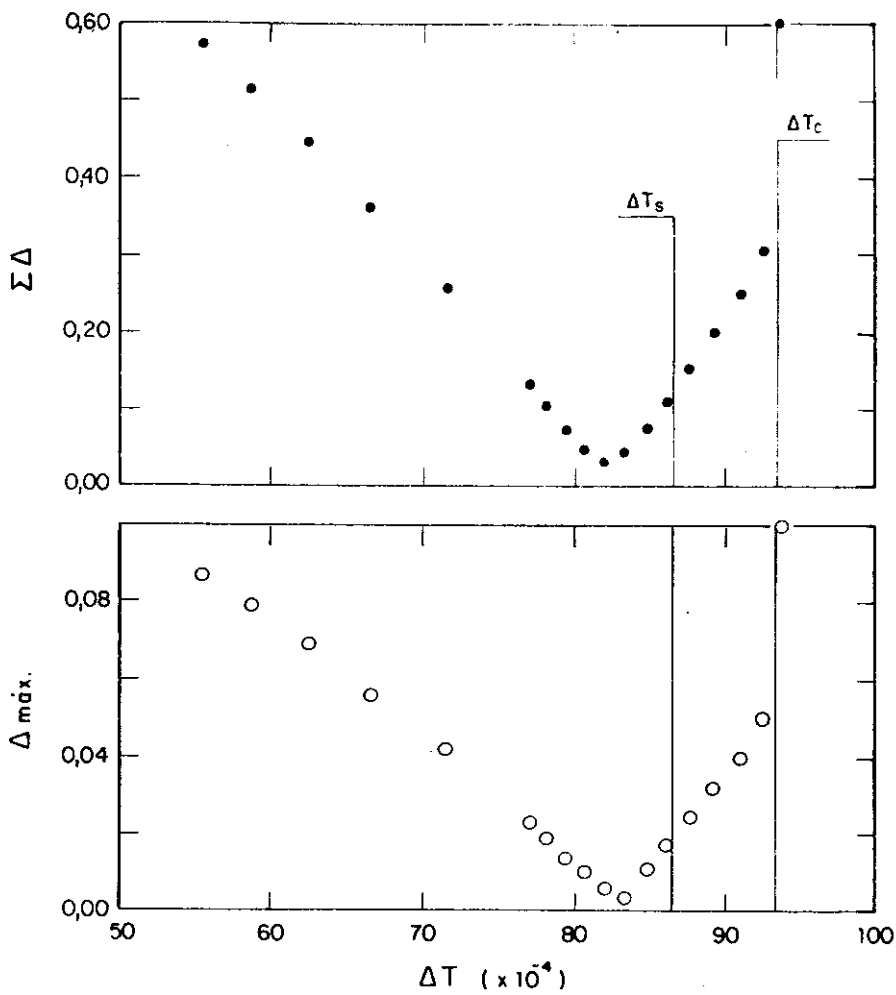


GRÁFICO III-15 : Método de Chaudhari - Influência do intervalo de tempo nos erros $\Delta_{\text{máx.}}$ e $\Sigma\Delta$ para $NX=100$ e $Br=1482$.

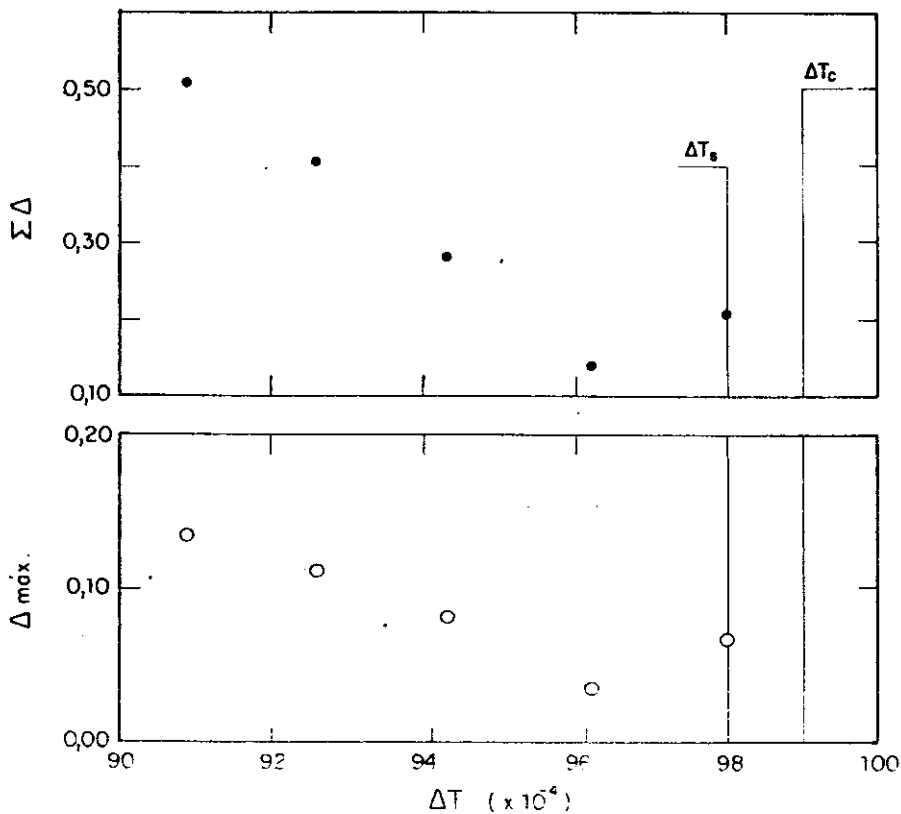


GRÁFICO III-16 : Método de Chaudhari - Influência do intervalo de tempo nos erros $\Delta_{\text{máx.}}$ e $\Sigma\Delta$ para $NX=100$ e $Br=10.000$.

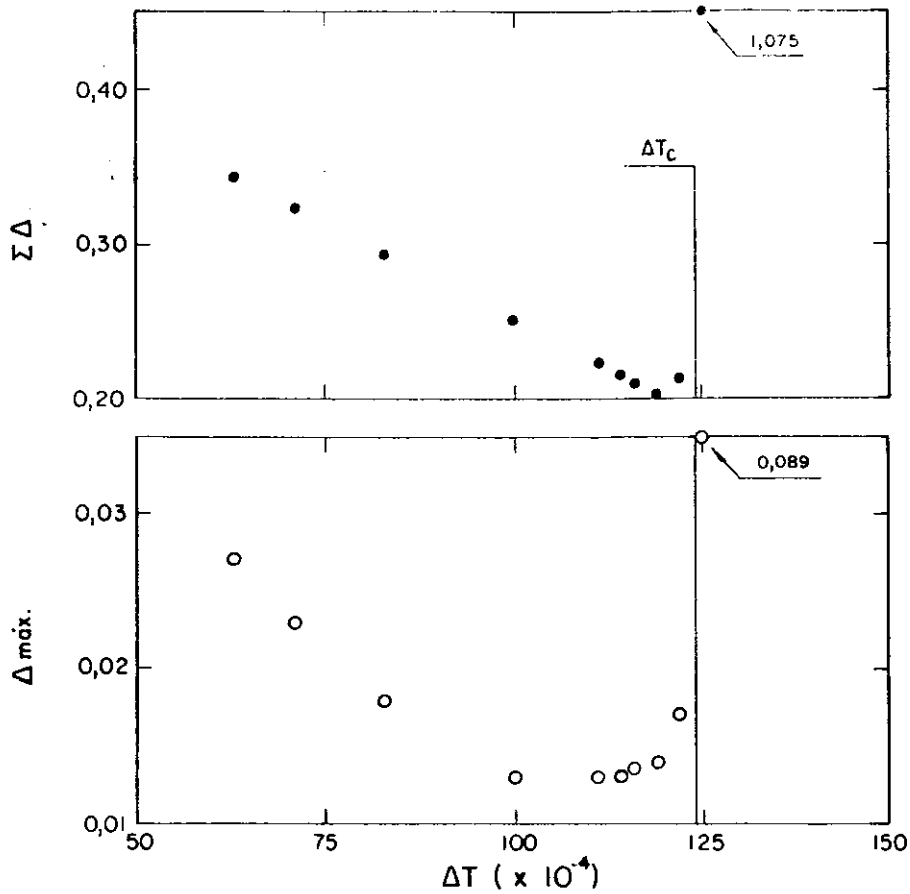


GRÁFICO III-17 : Método de Chaudhari - Influência do intervalo de tempo nos Erros $\Delta_{\text{máx.}}$ e $\Sigma\Delta$ para $NX=50$ e $Br=100$.

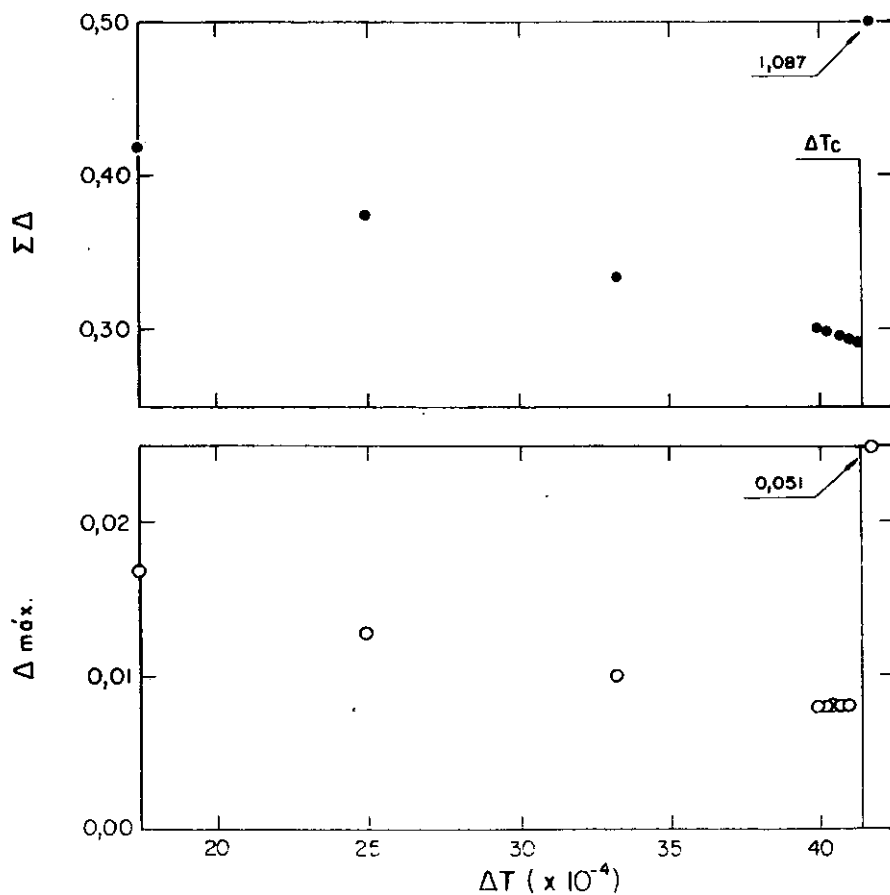


GRÁFICO III-18 : Método de Chaudhari - Influência do intervalo de tempo nos Erros $\Delta_{\text{máx.}}$ e $\Sigma\Delta$ para $NX=100$ e $Br=100$.

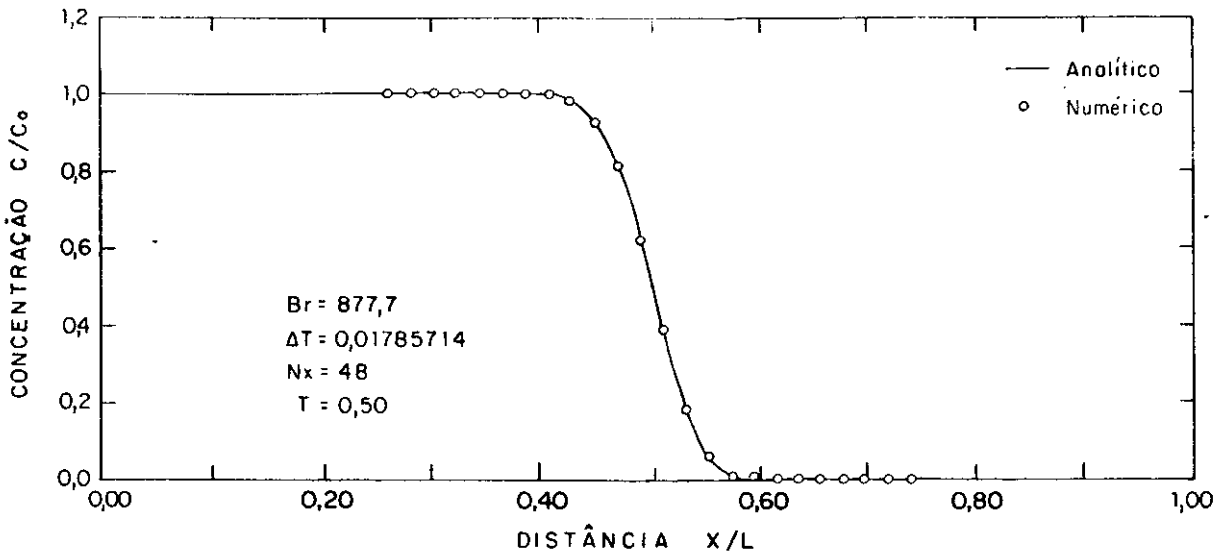


GRÁFICO III-19 : Melhor resultado - obtido para o método de Chaudhari.

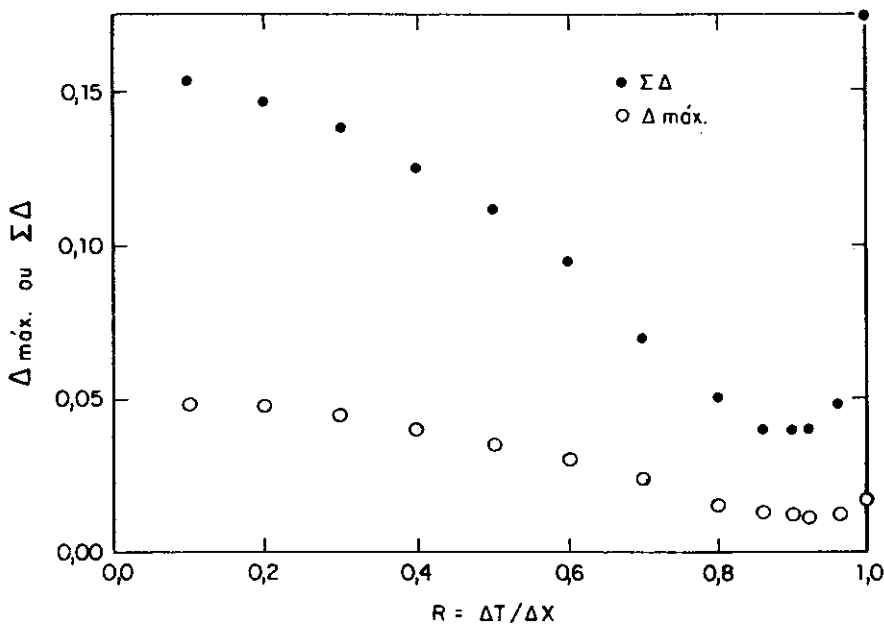


GRÁFICO III-20 : Método de Laumbach - Influência do parâmetro R nos erros $\Delta_{máx.}$ e $\Sigma \Delta$ para $NX = 48$ e $Br = 877,7$.

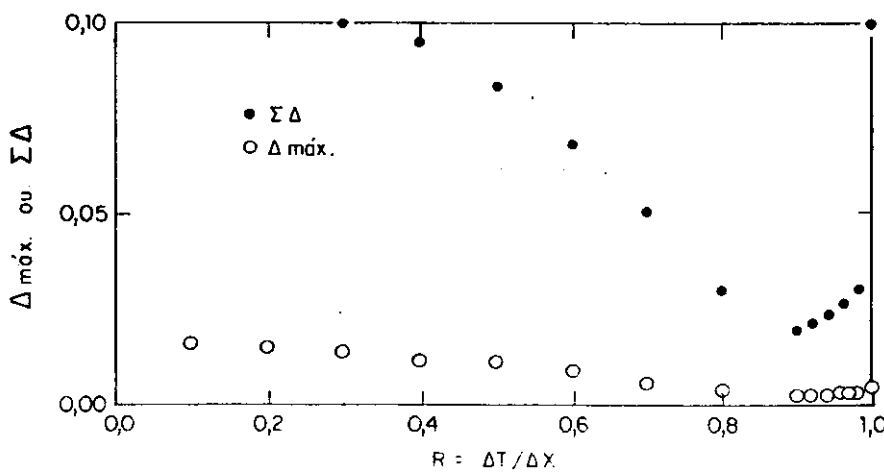


GRÁFICO III-21 : Método de Laumbach - Influência do parâmetro R nos erros $\Delta_{máx.}$ e $\Sigma \Delta$ para $NX = 96$ e $Br = 877,7$.

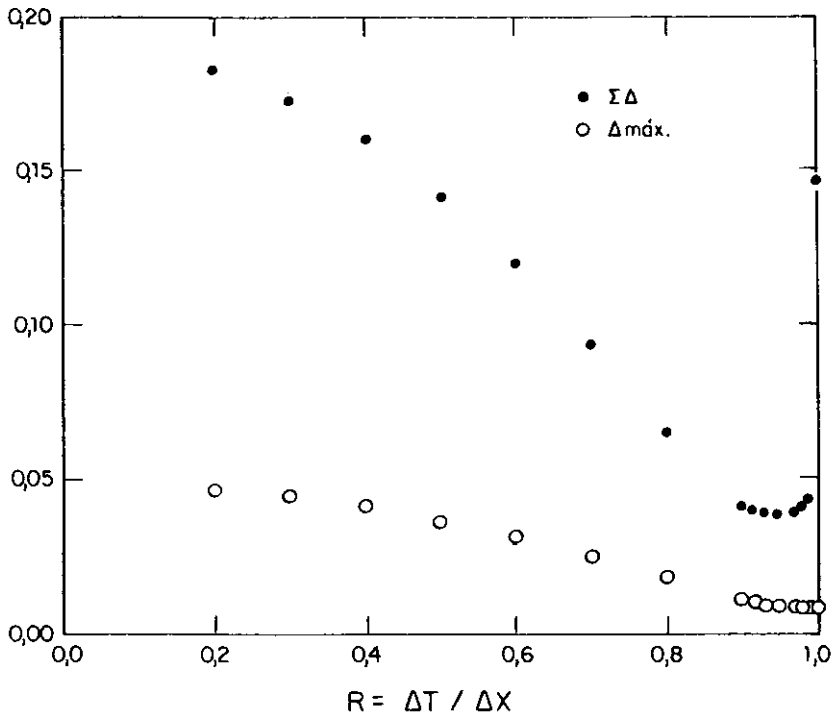


GRÁFICO III-22 : Método de Laumbach - Influência do parâmetro R nos erros $\Delta_{\text{máx.}}$ e $\Sigma\Delta$ para $NX=200$ e $Br=10.000$.

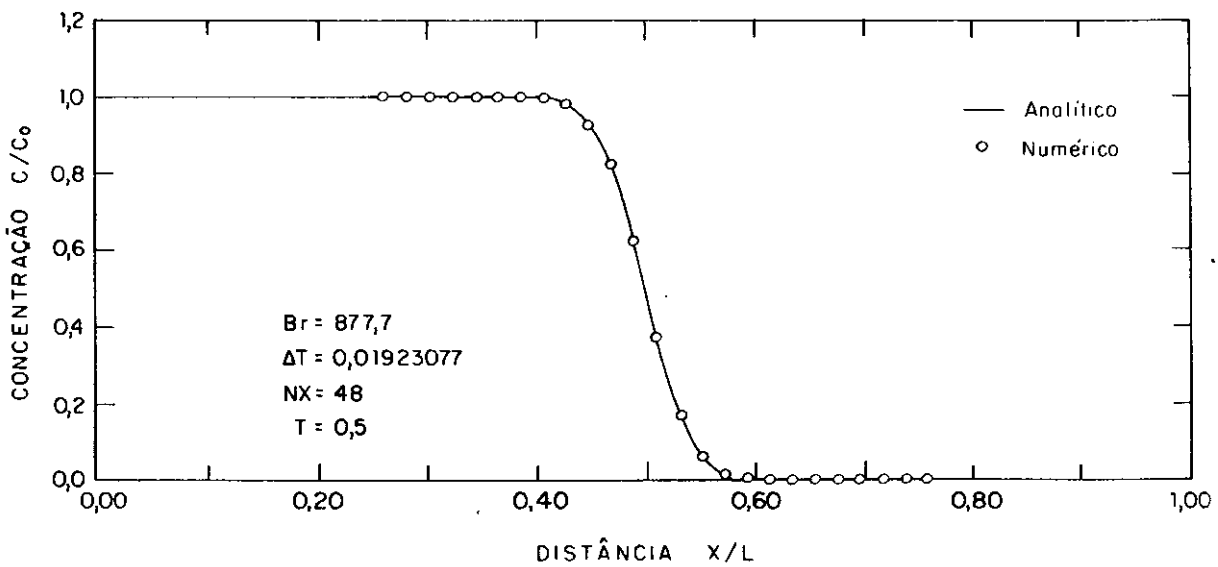


GRÁFICO III-23 : Melhor resultado obtido para o método de Laumbach.

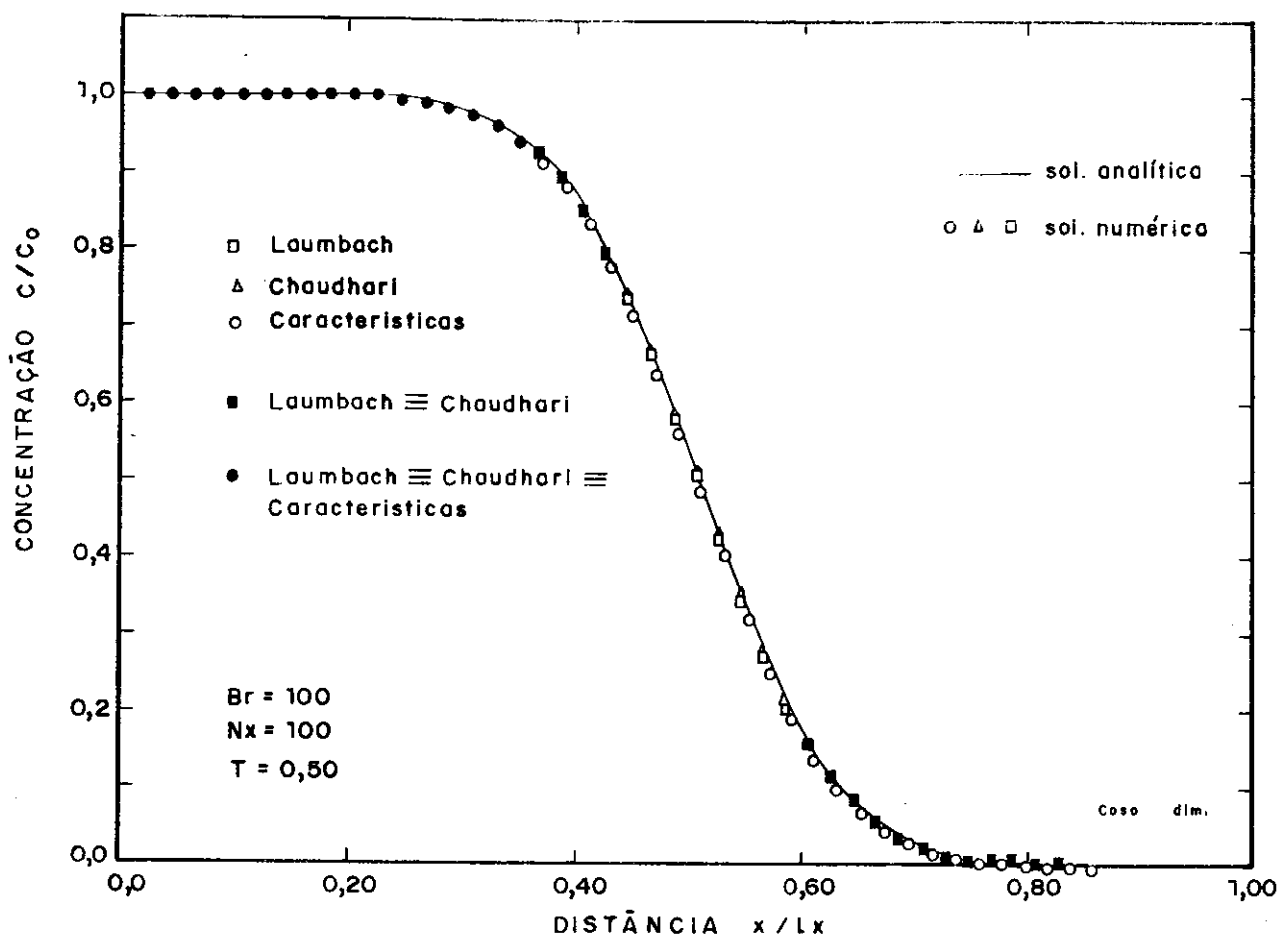


GRÁFICO III-24 : Melhores resultados obtidos para os métodos de Chaudhari, Laumbach e Características, conforme tabela III-13

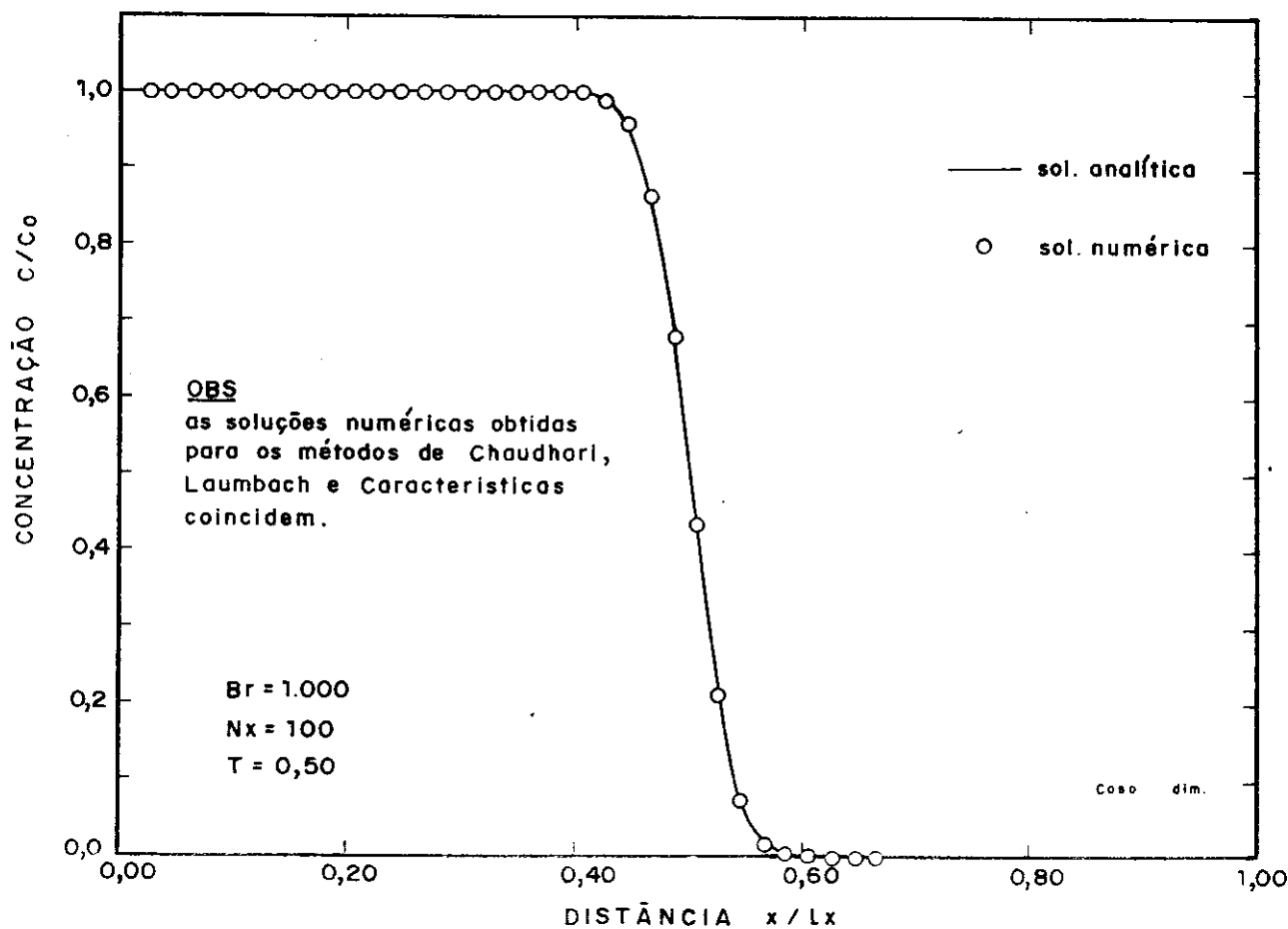


GRÁFICO III-25 : Melhores resultados obtidos para os métodos de Chaudhari, Laumbach e Características, conforme tabela III-13

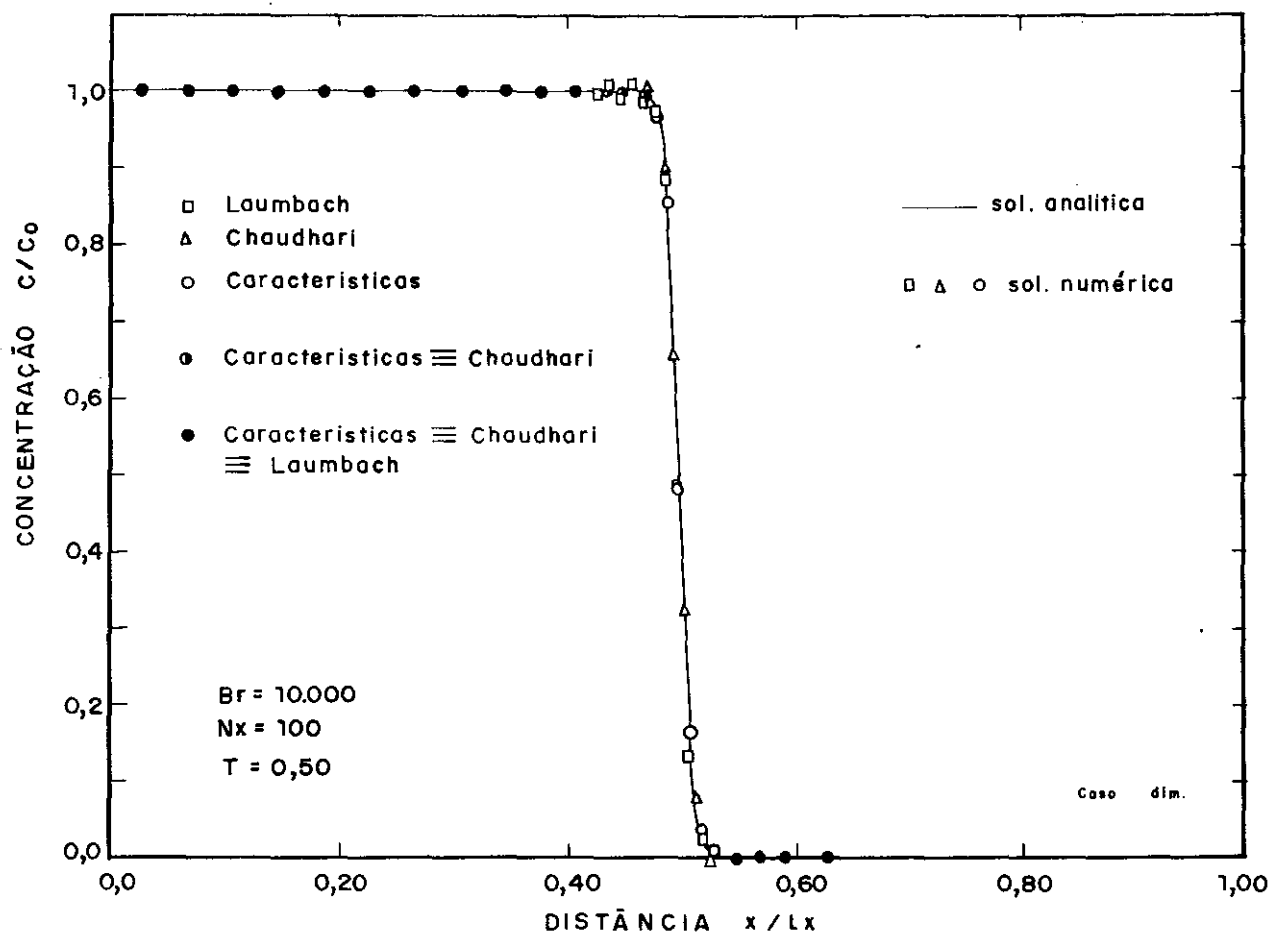


GRÁFICO III-26: Melhores resultados obtidos para os métodos de Chaudhari, Laumbach e Características, conforme tabela III-13

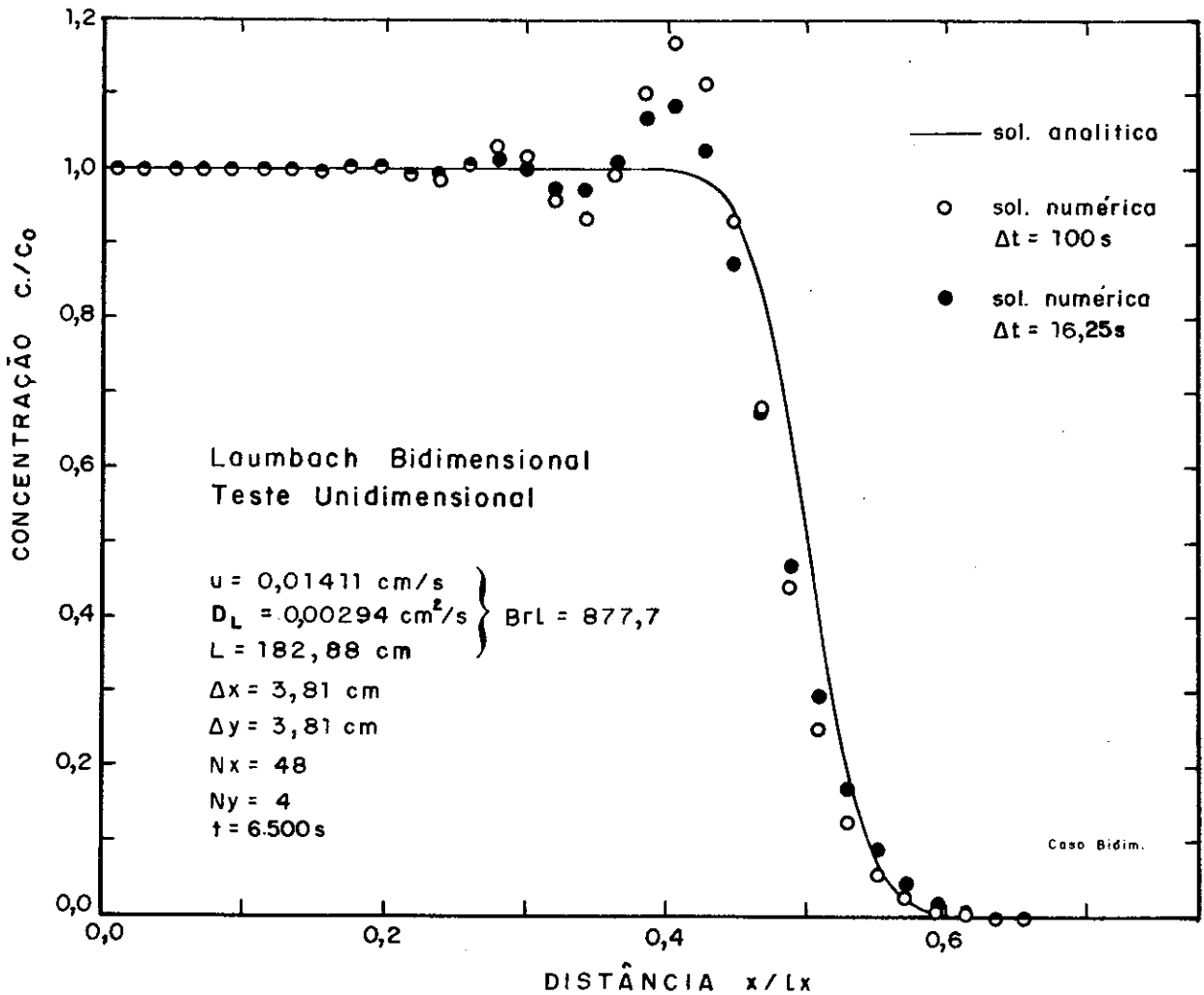


GRÁFICO III - 27 : Teste unidimensional para o método bidimensional de Laumbach, resolvido pela técnica ADIP.

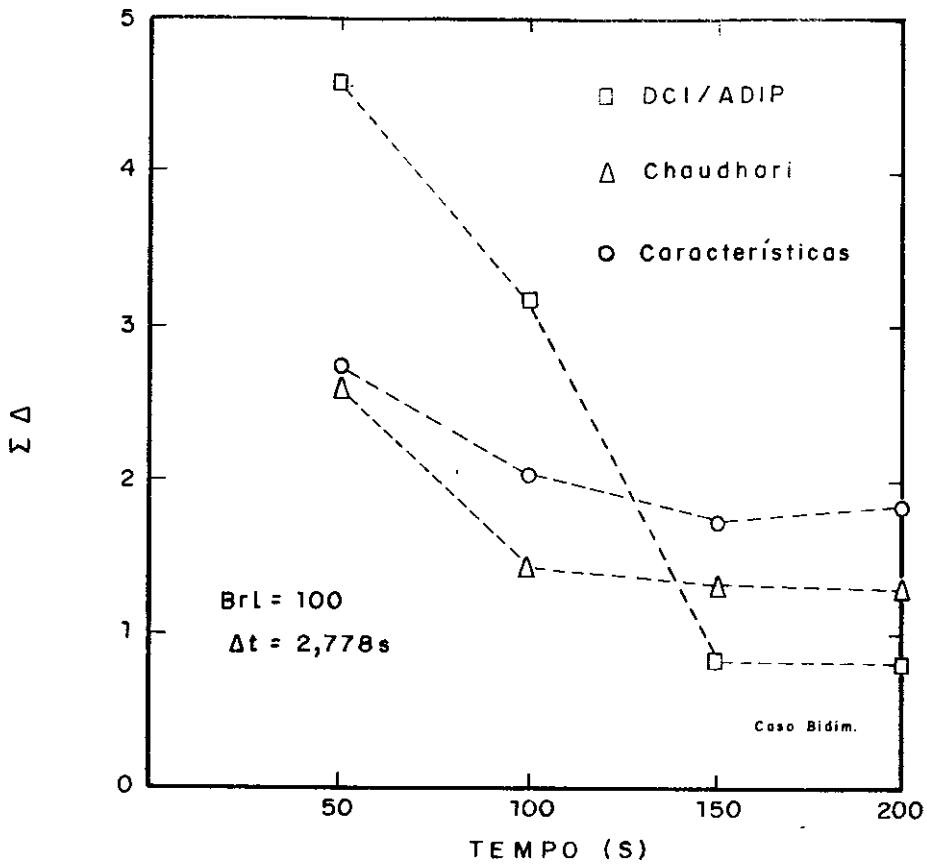


GRÁFICO III-28: Variação do desvio $\Sigma\Delta$ em função do tempo para os métodos bidimensionais DCI/ADIP, Chaudhari e Características.

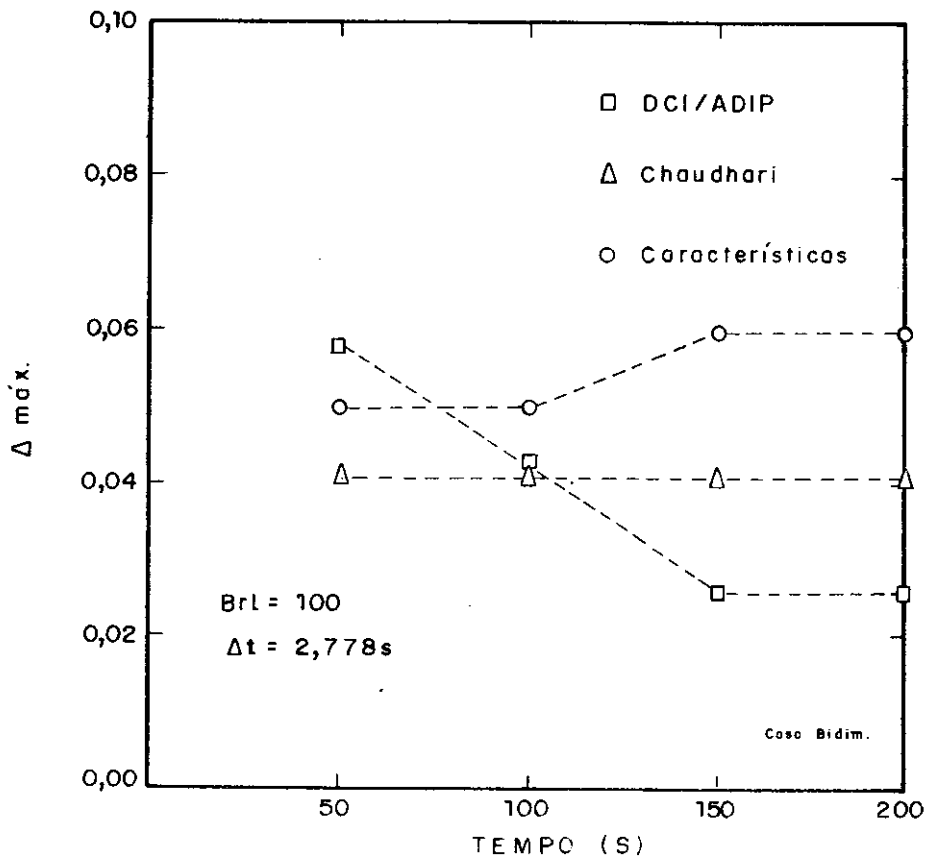


GRÁFICO III-29: Variação do desvio $\Delta máx.$ em função do tempo para os métodos bidimensionais DCI/ADIP, Chaudhari e Características.

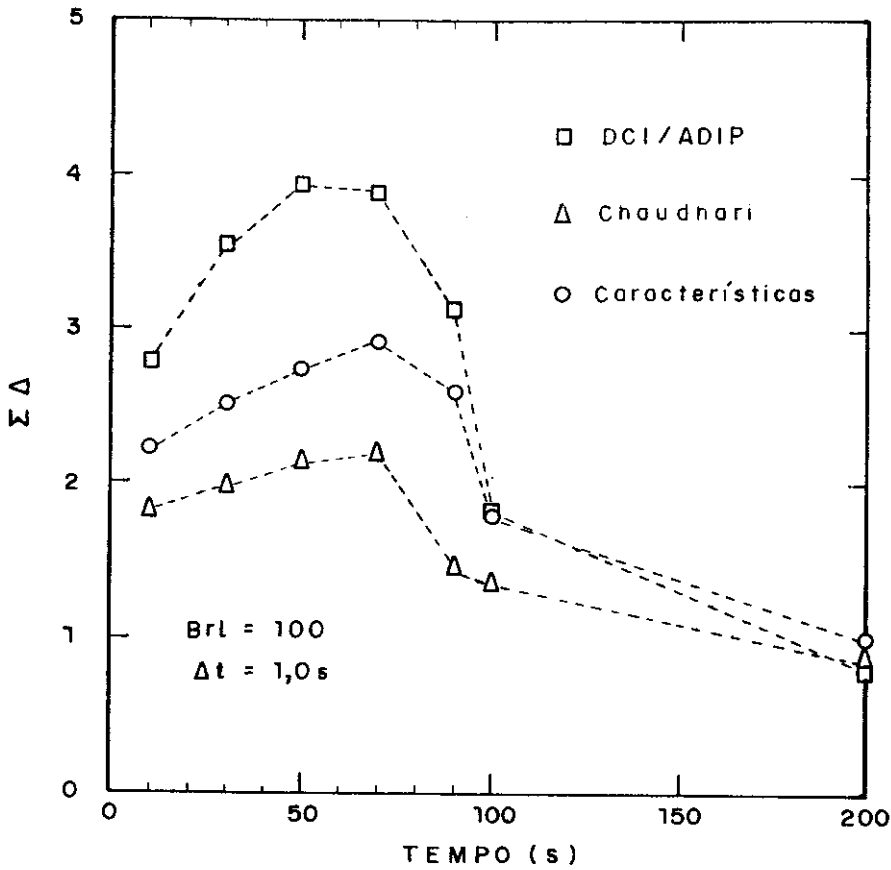


GRÁFICO III-30: Variação do desvio $\Sigma\Delta$ em função do tempo para os métodos bidimensionais DCI/ADIP, Chaudhari e Características.

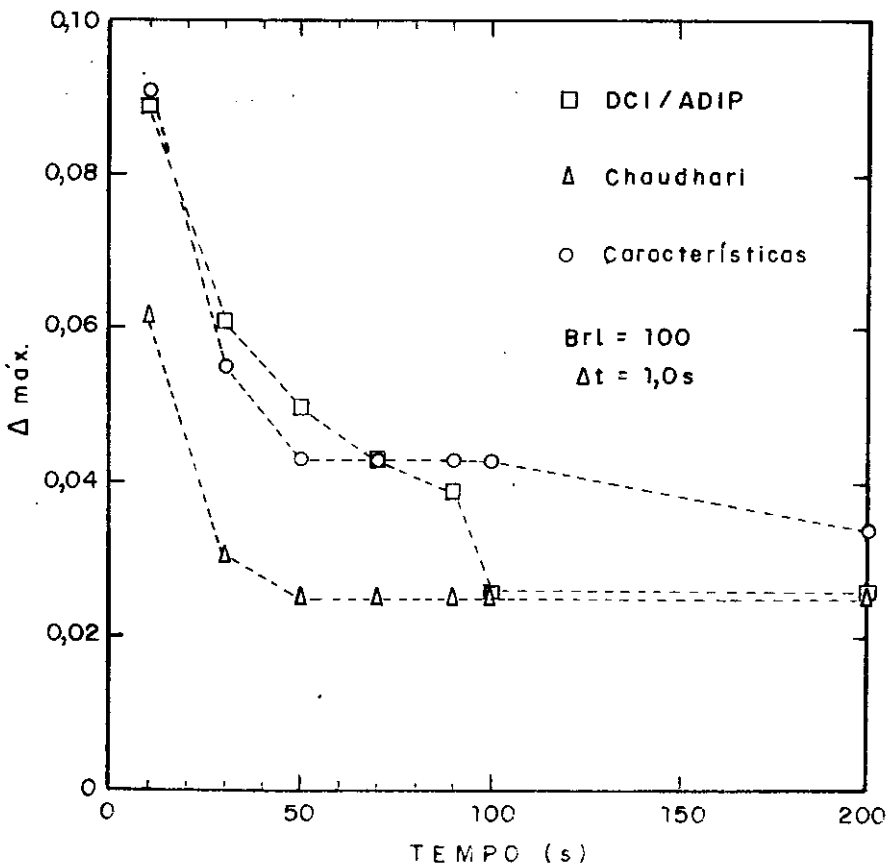


GRÁFICO III-31: Variação do desvio $\Delta máx.$ em função tempo para os métodos bidimensionais DCI/ADIP, Chaudhari e Características.

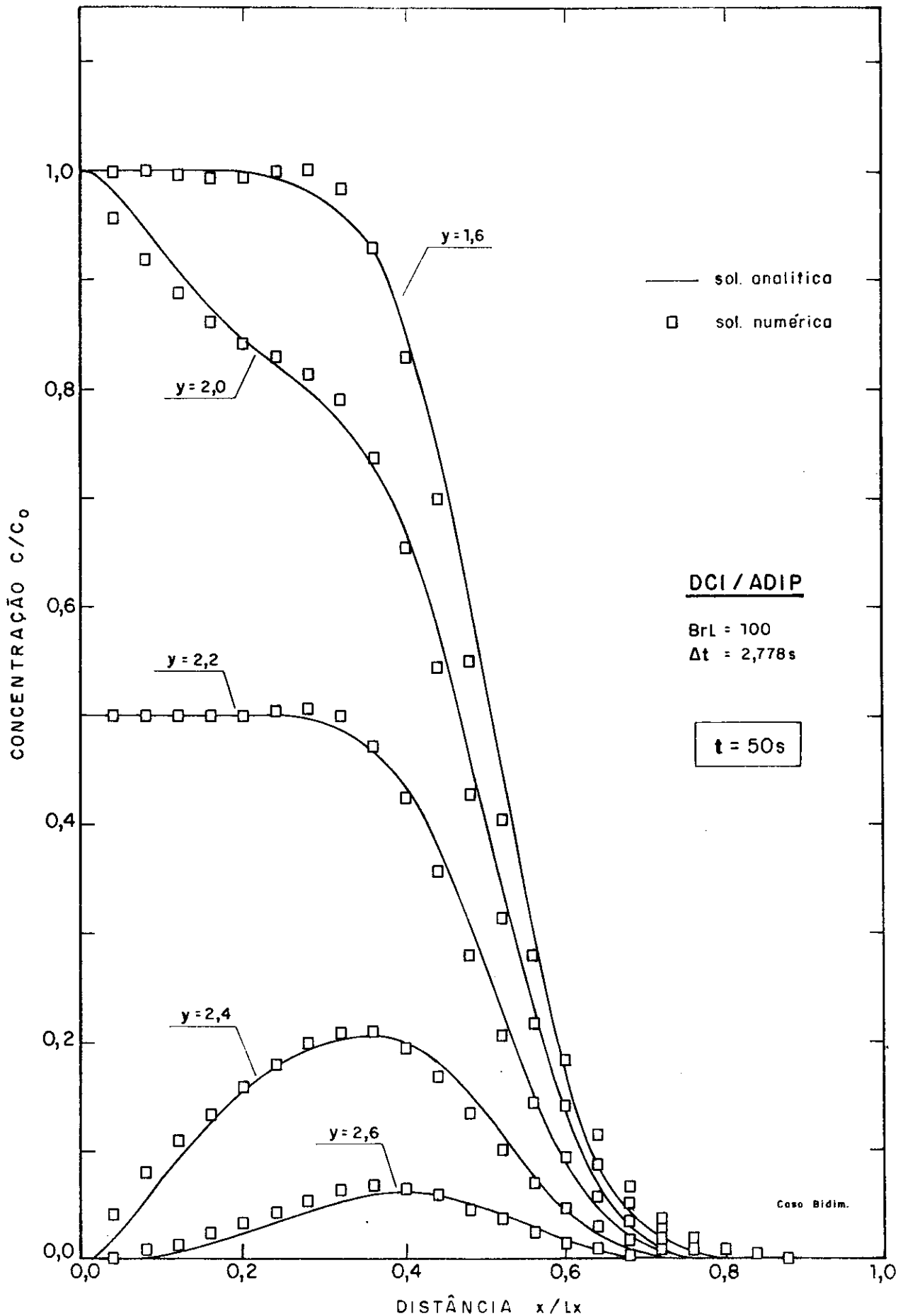


GRÁFICO III-32 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, pelo método DCI/ADIP, a partir dos dados da figura III-6.

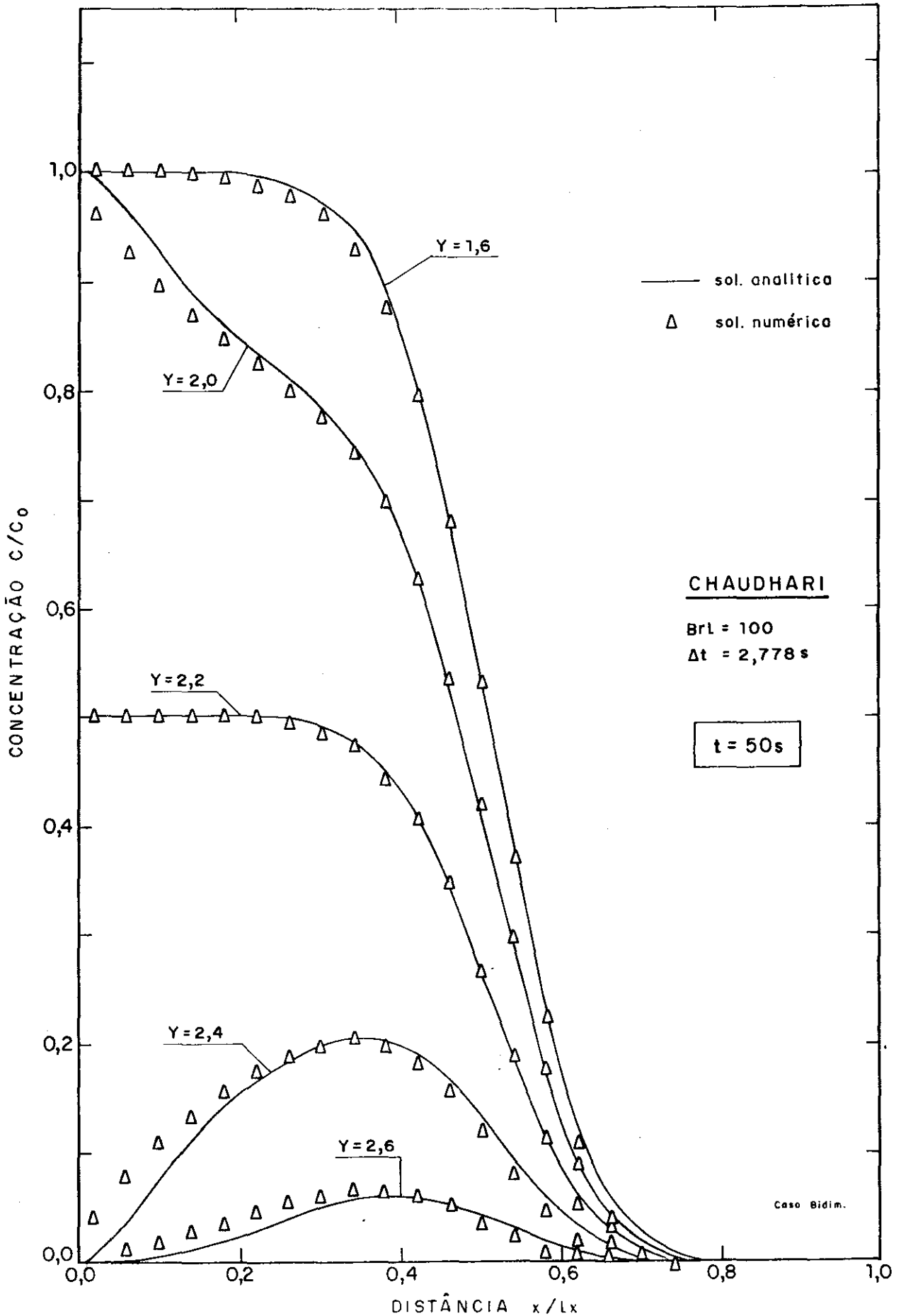


GRÁFICO III-33 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, pelo método de CHAUDHARI, a partir dos dados da figura III-6.

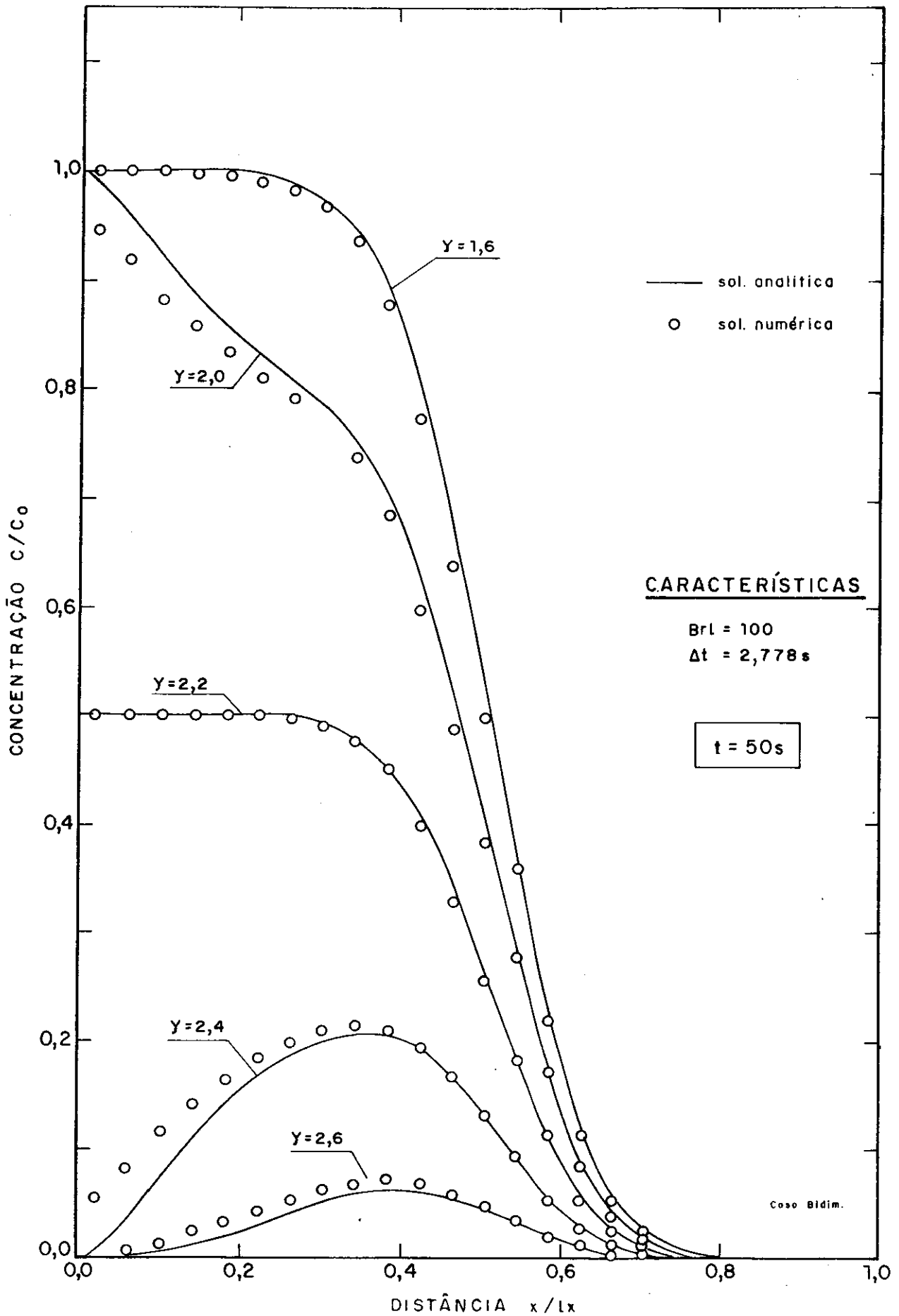


GRÁFICO III-34 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, pelo método das Características, a partir dos dados da figura III-6.

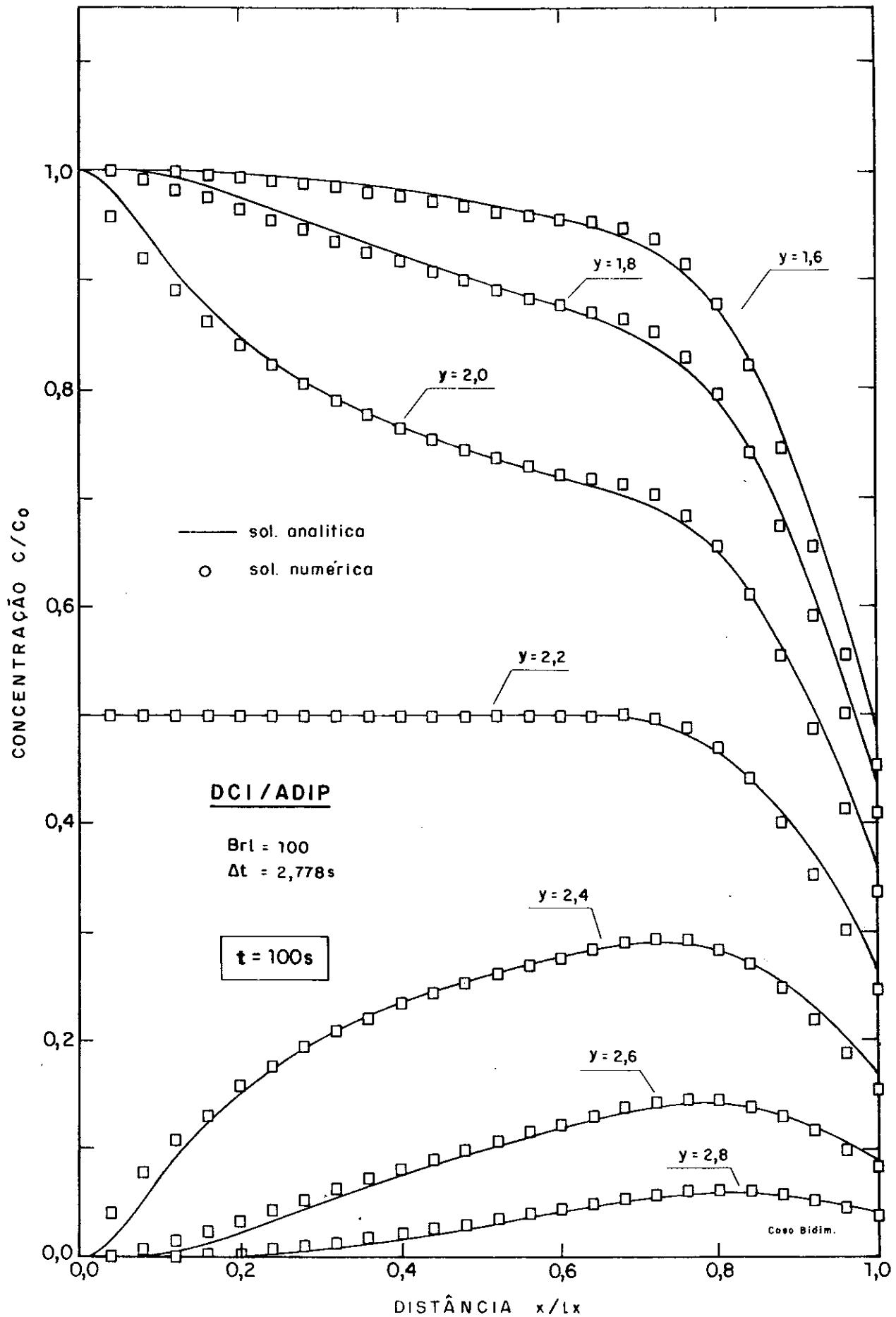


GRÁFICO III-35 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100 s$, pelo método DCI / ADIP, a partir dos dados da figura III-6

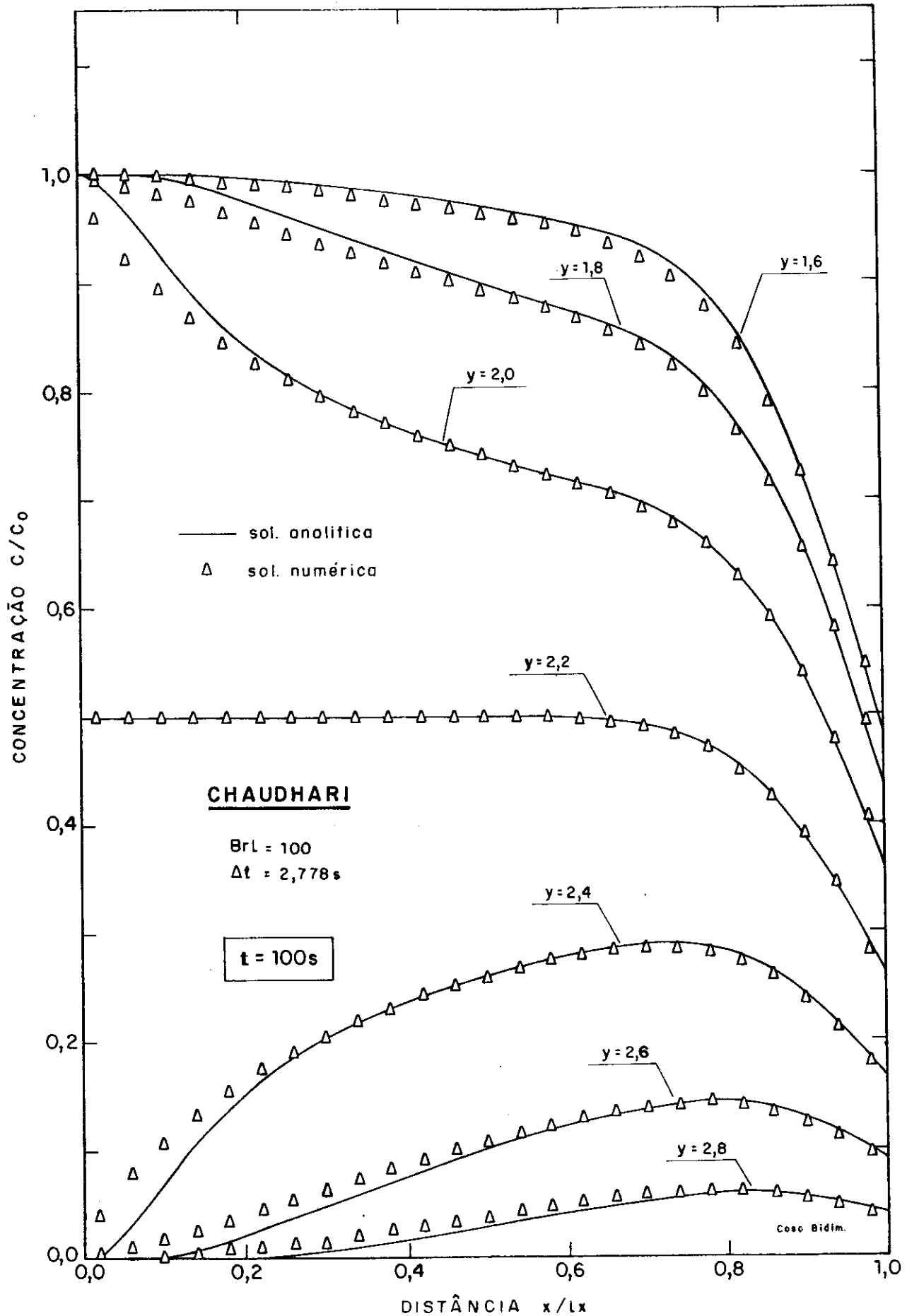


GRÁFICO III-36 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, pelo método de CHAUDHARI, a partir dos dados da figura III-6

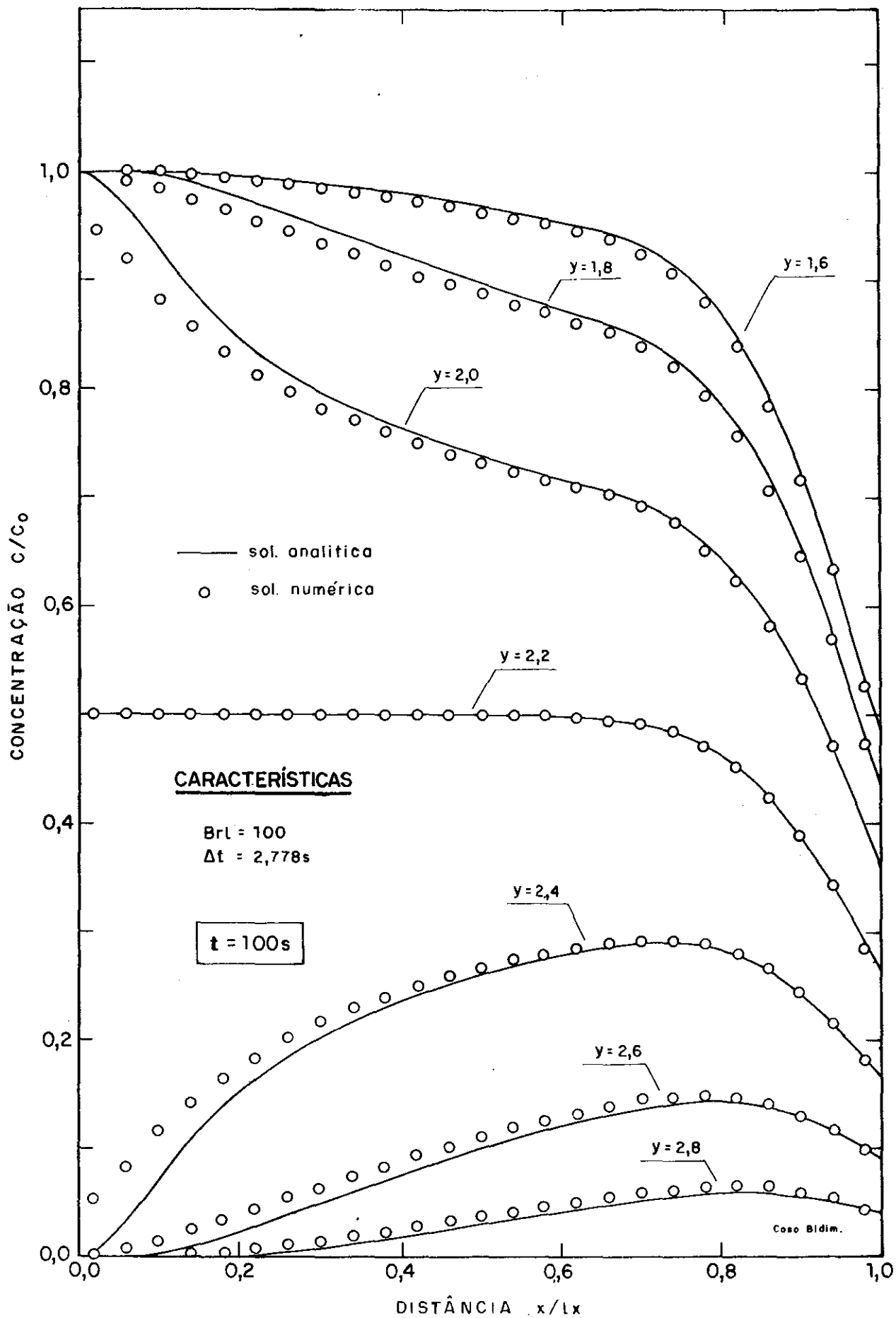


GRÁFICO III-37 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, pelo método das Características, a partir dos dados da figura III-6

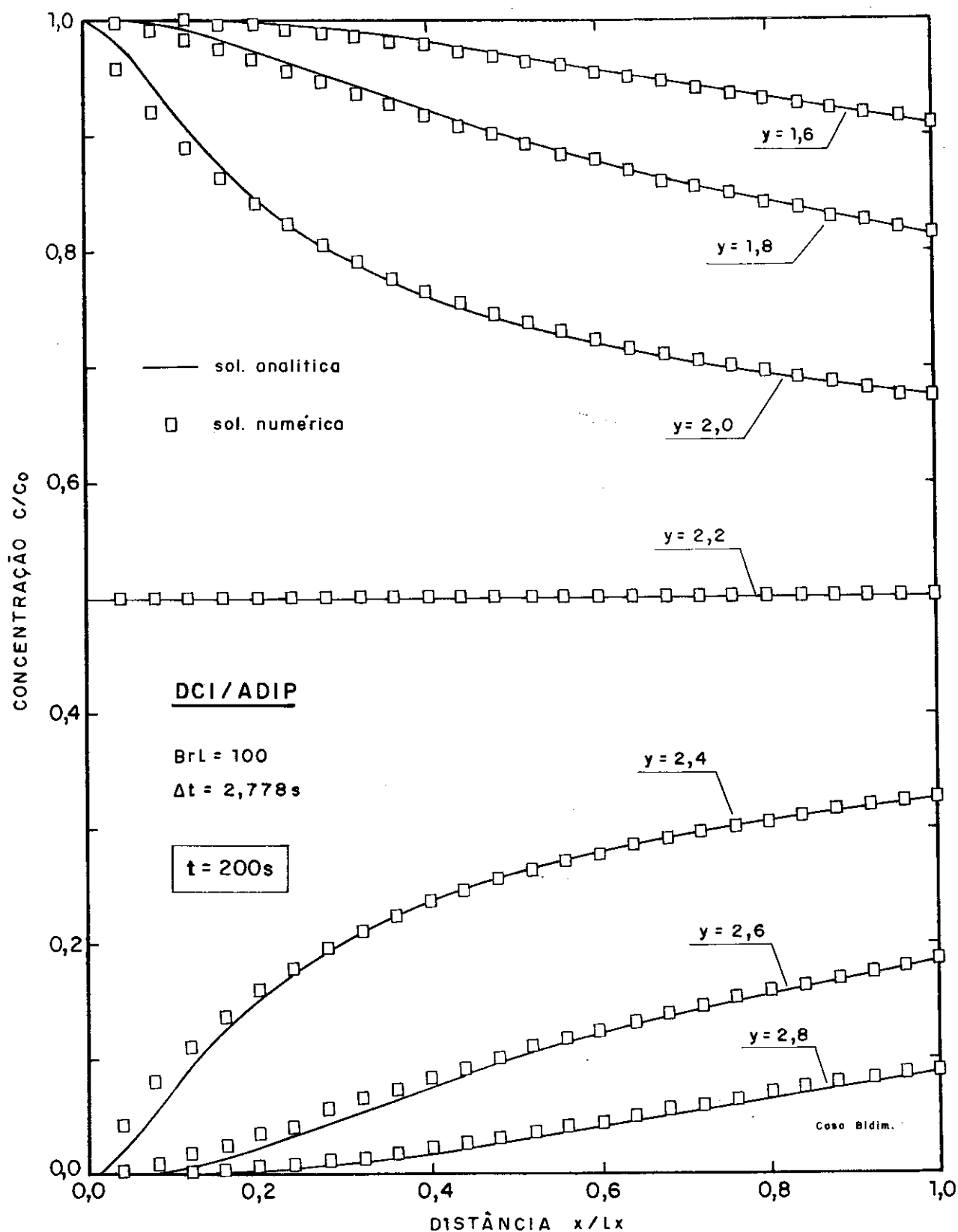


GRÁFICO III-38: Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 200s$, pelo método DCI/ADIP, a partir dos dados da figura III-6.

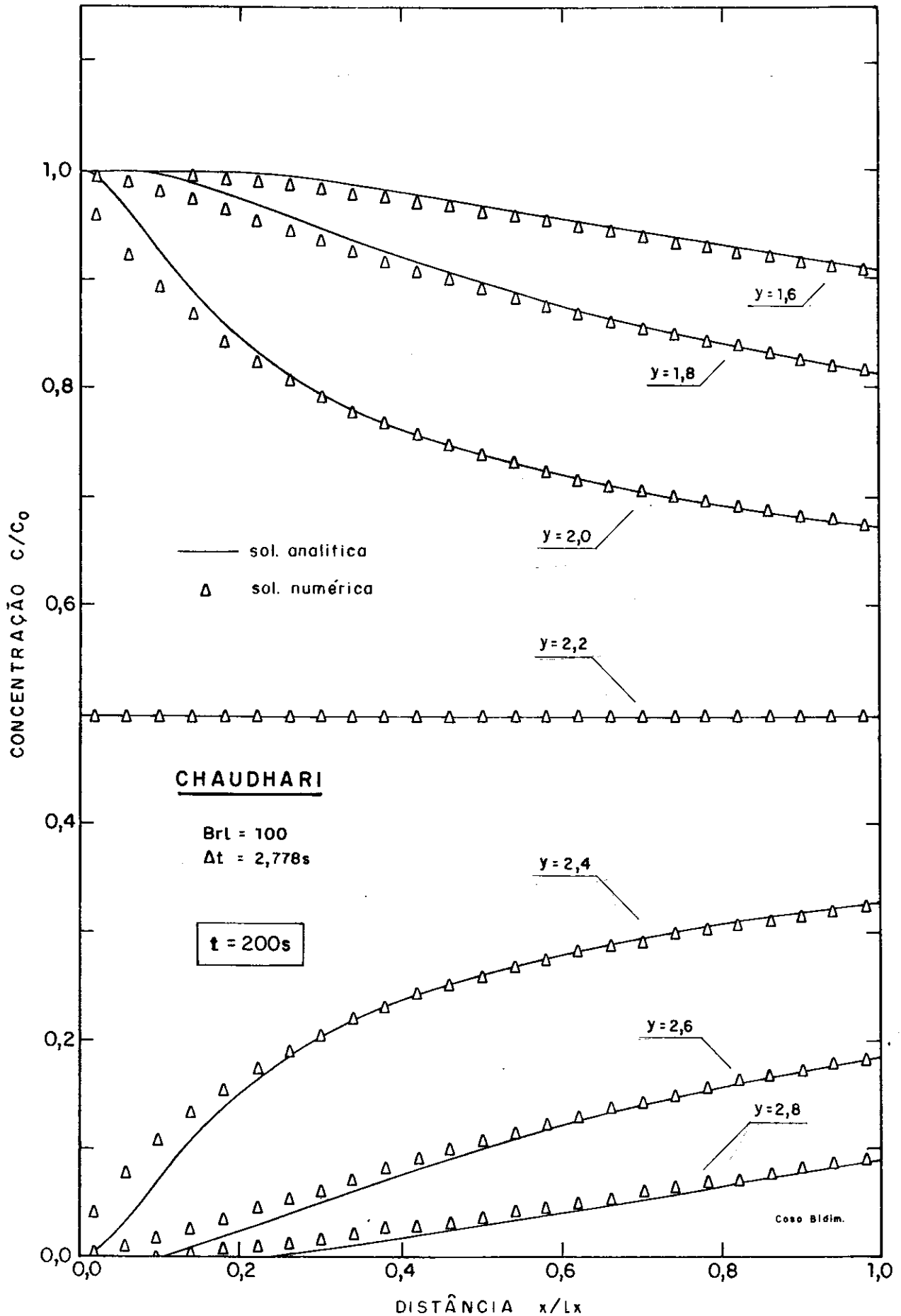


GRÁFICO III-39 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 200s$, pelo método de CHAUDHARI, a partir dos dados da figura III-6

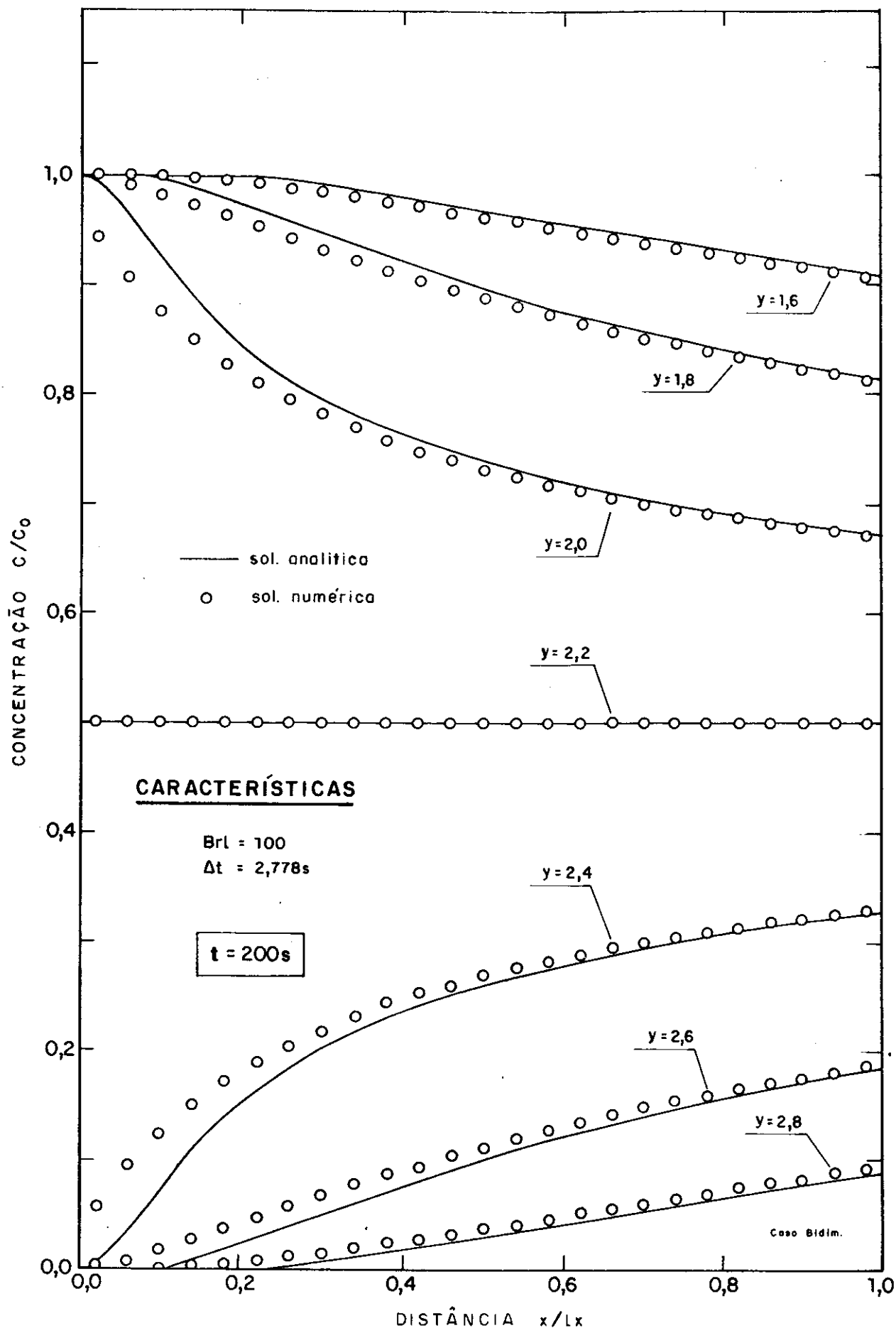


GRÁFICO III-40 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 200s$, pelo método das Características, a partir dos dados da figura III-6.

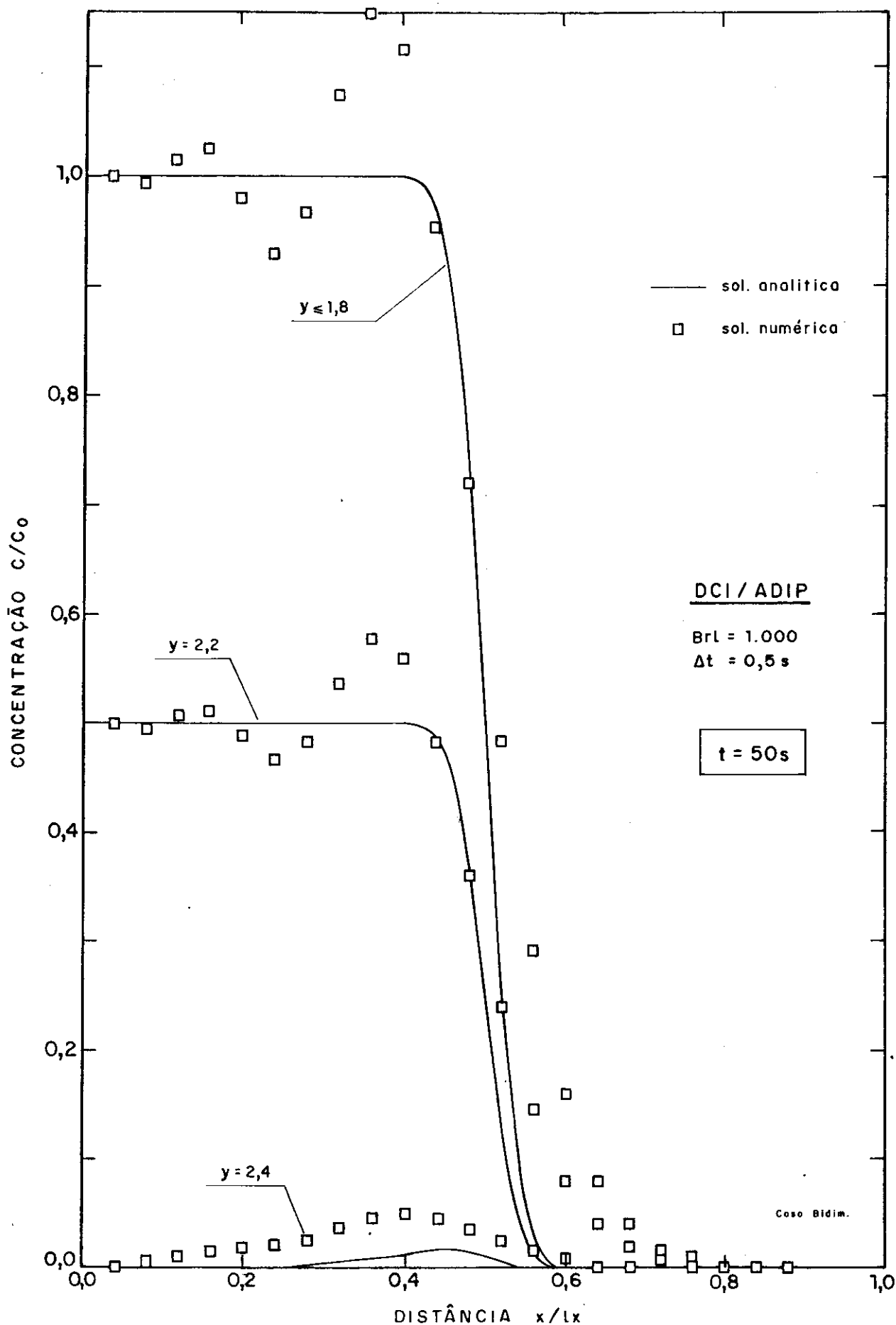


GRÁFICO III-41 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50\text{s}$, pelo método DCI/ADIP, a partir dos dados da figura III-6.

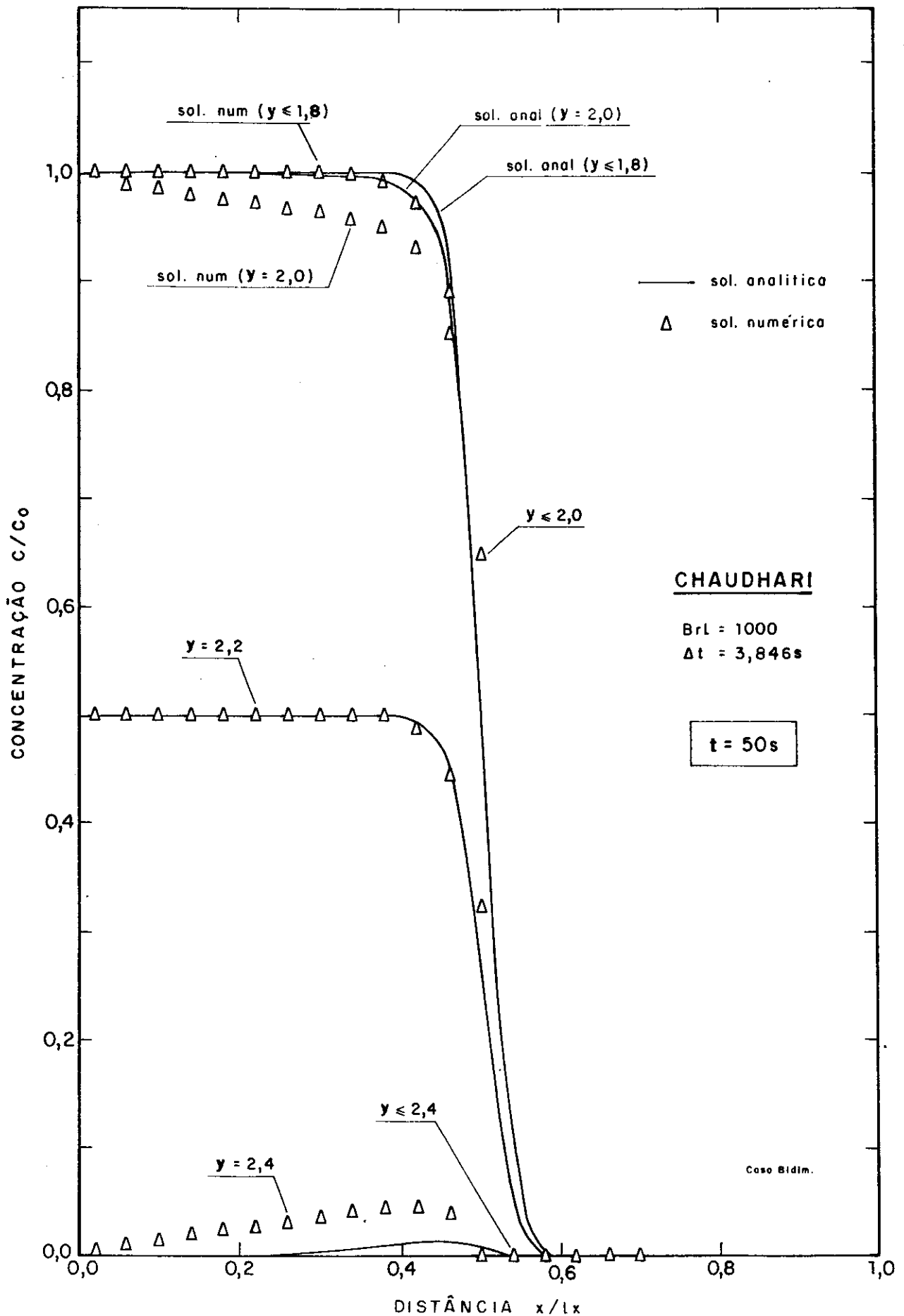


GRÁFICO III-42 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, pelo método de CHAUDHARI, a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,001$ e $D_T = 0,0001 \text{ cm}^2/\text{s}$).

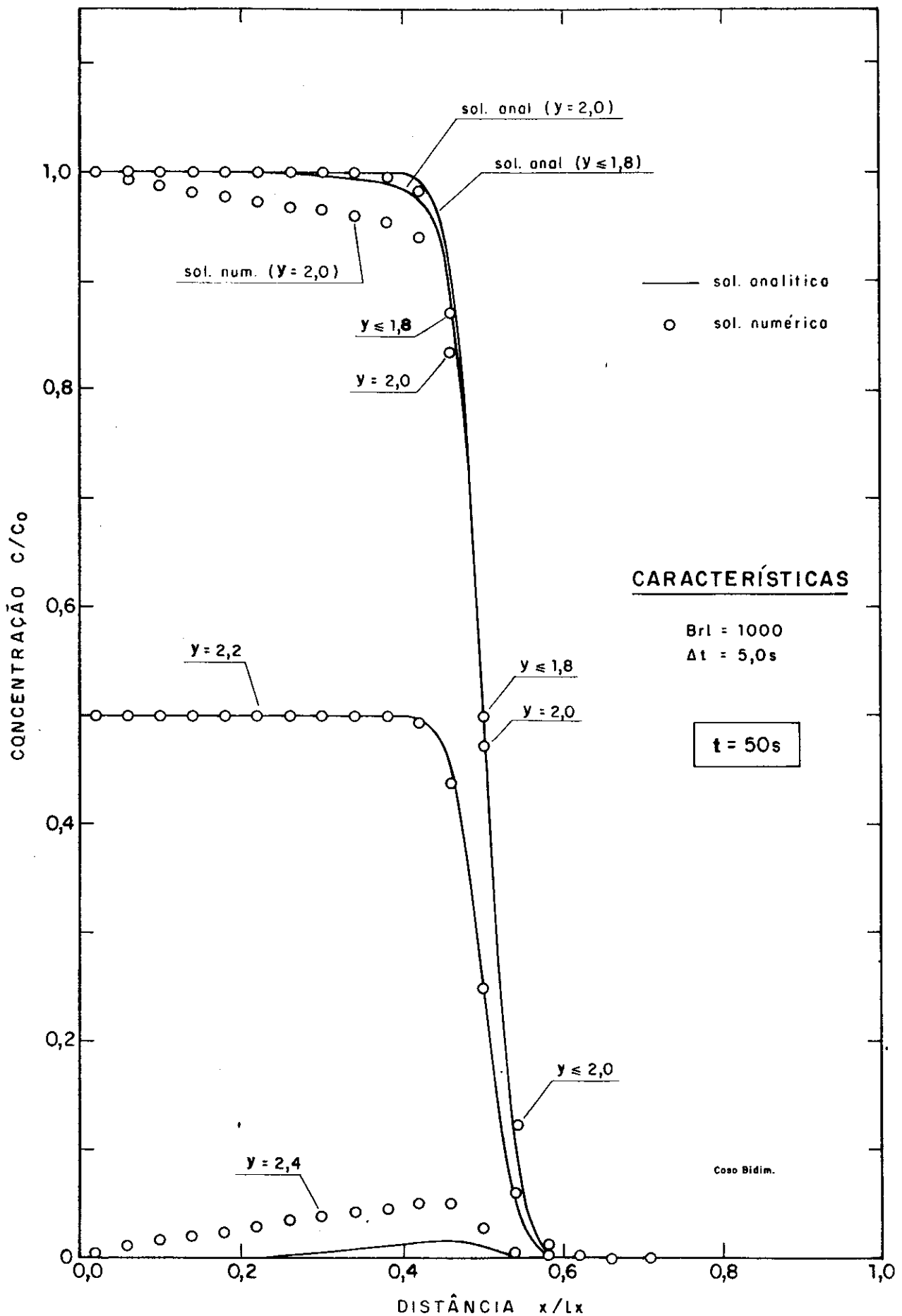


GRÁFICO III-43 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, pelo método das Características, a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,001$ e $D_T = 0,0001 \text{ cm}^2/\text{s}$).

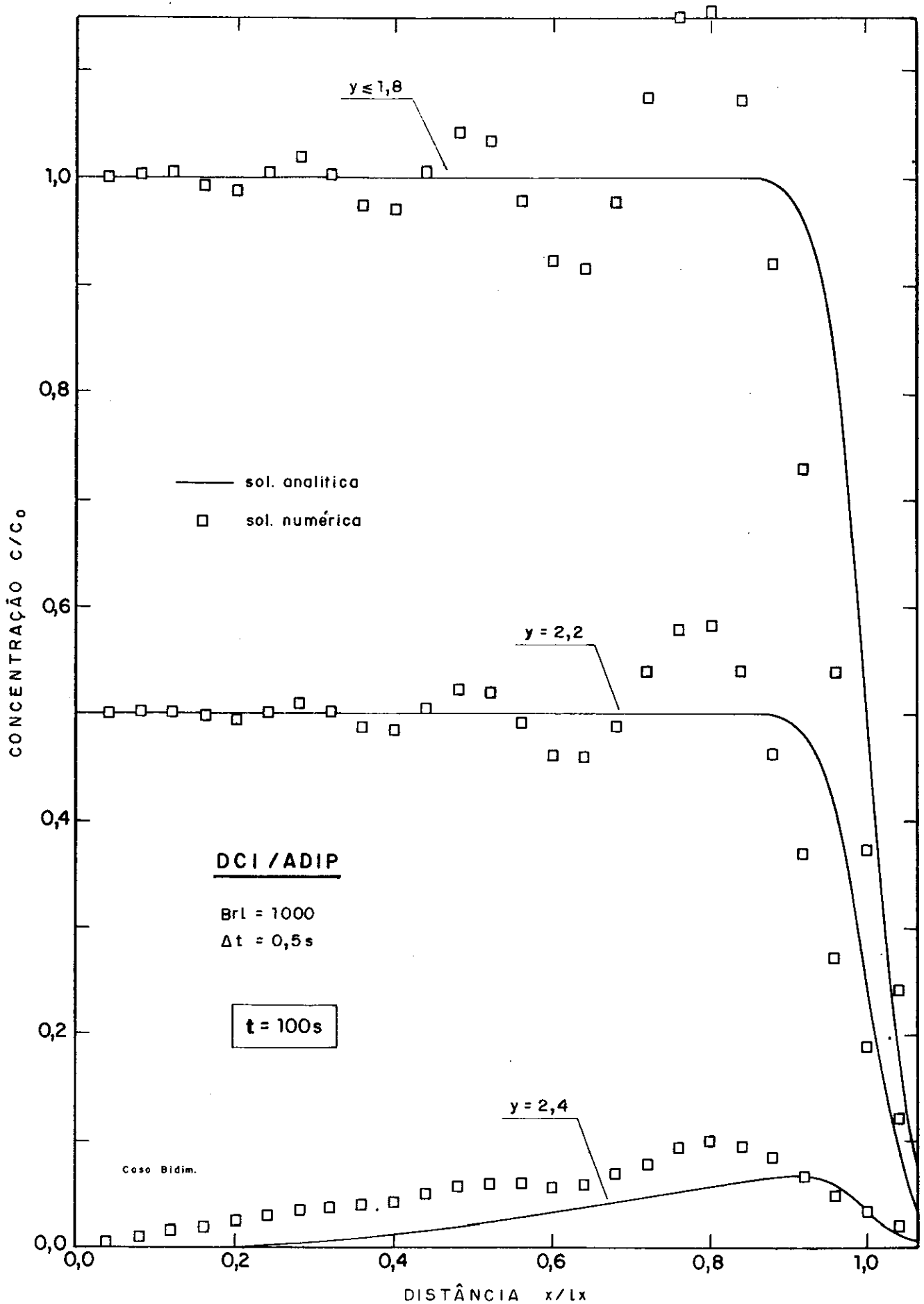


GRÁFICO III-44 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, pelo método DCI/ADIP, a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,001$ e $D_T = 0,0001 \text{ cm}^2/s$).

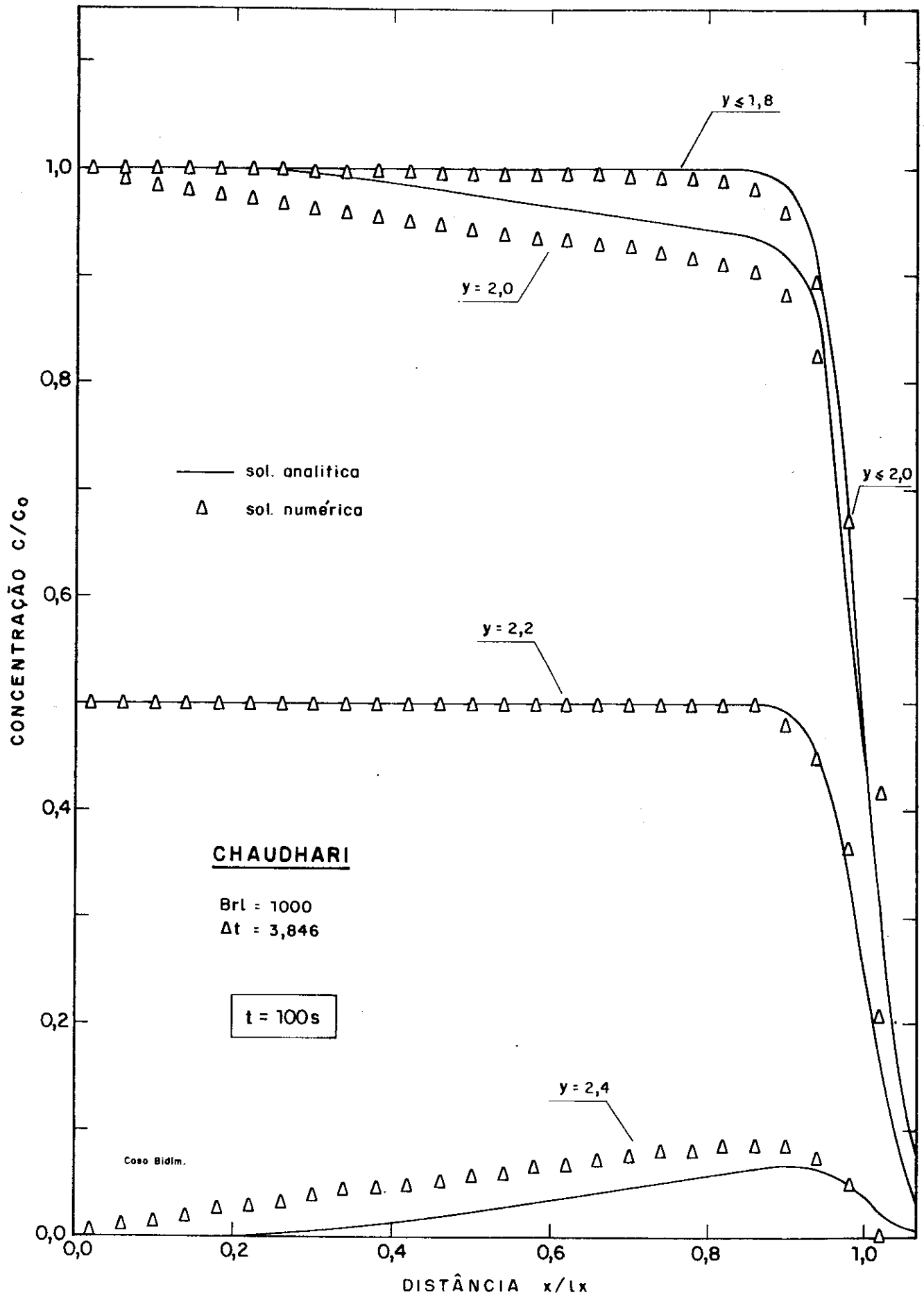


GRÁFICO III-45 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, pelo método de CHAUDHARI, a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,001$ e $D_T = 0,0001 \text{ cm}^2/s$).

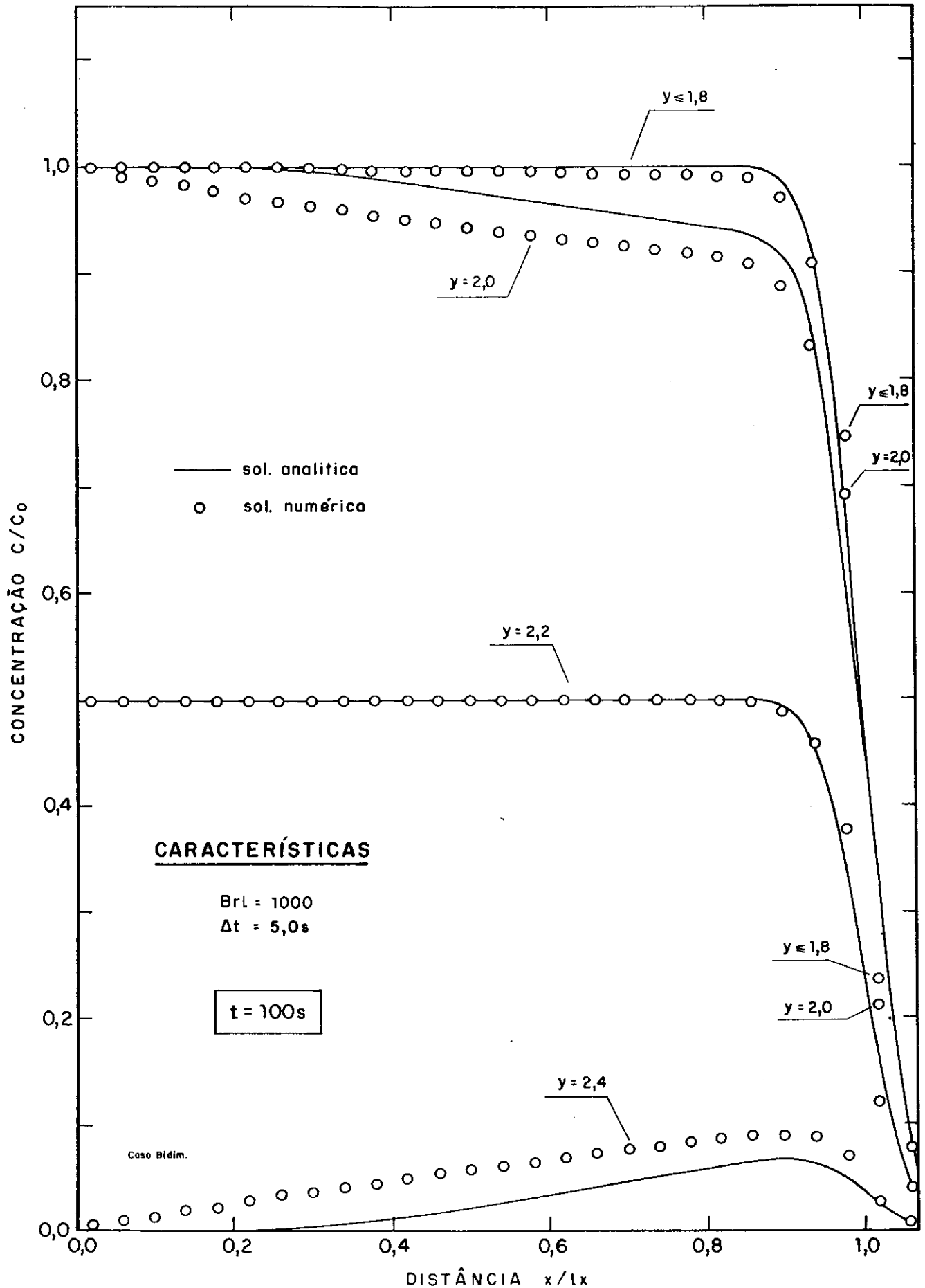


GRÁFICO III-46 : Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, pelo método das Características, a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,001$ e $D_T = 0,0001 \text{ cm}^2/s$).

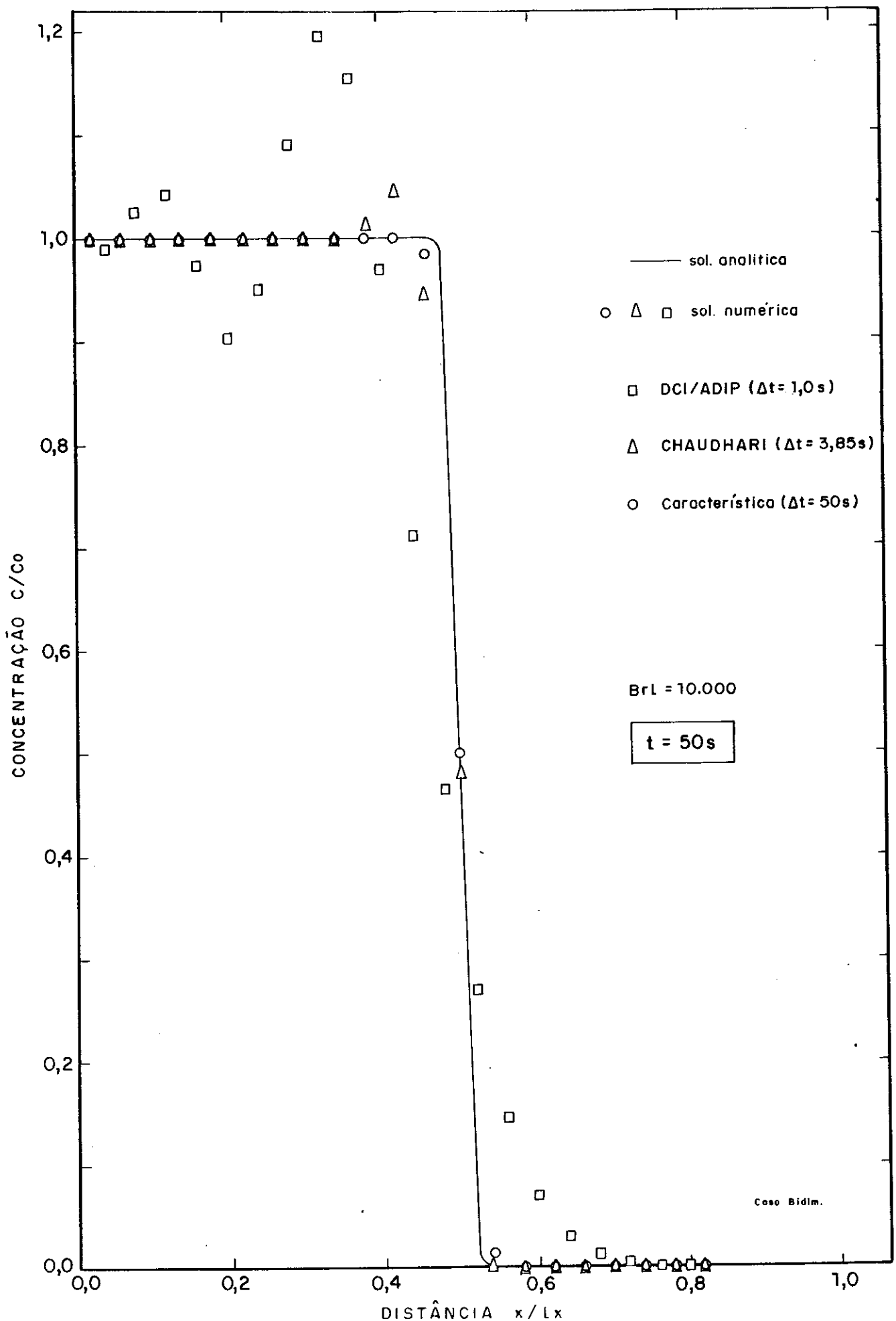


GRÁFICO III-47: Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 50s$, para os métodos DCI/ADIP, CHAUDHARI e Características a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,0001$ e $D_T = 0,00001 cm^2/s$).

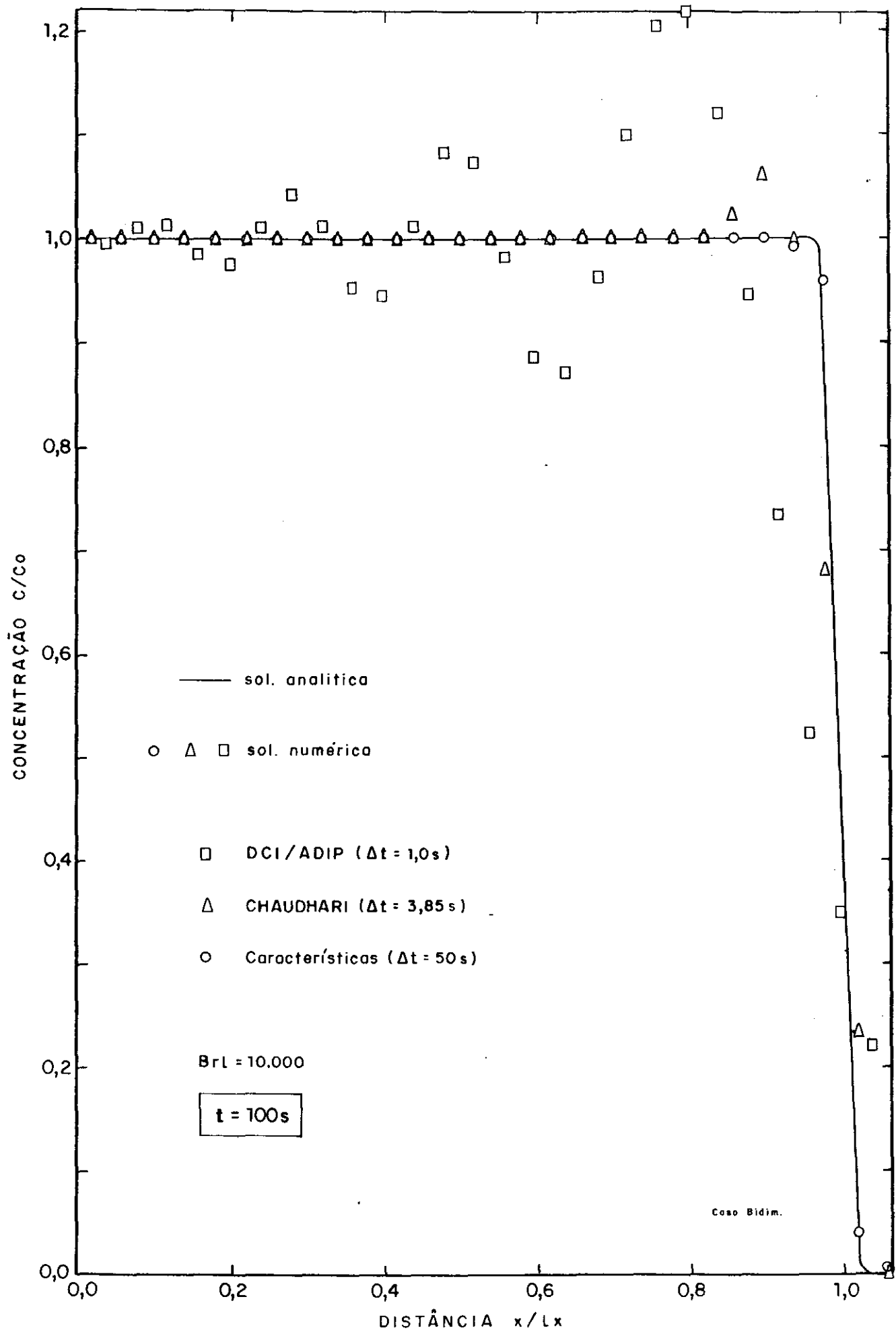


GRÁFICO III-48: Perfis Longitudinais de dispersão obtidos, para o tempo $t = 100s$, para os métodos DCI/ADIP, CHAUDHARI e Características a partir dos dados da figura III-6 (com $D_L = 0,0001$ e $D_r = 0,00001cm^2/s$).

CAPÍTULO IV

APRESENTAÇÃO DE UM MODELO MATEMÁTICO BIDIMENSIONAL
PARA ANÁLISE DA POLUIÇÃO EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

IV.1 INTRODUÇÃO

O objetivo deste capítulo é apresentar um modelo computacional para resolver o esquema de dispersão que se constitui nas equações de fluxo, de Darcy, de transporte de massa e de estado da mistura, conforme descrito no item II.2.

Em geral, pode-se considerar que as diversas formas de poluição da água subterrânea comportam-se como traçadores, não alterando, significativamente, nem a densidade nem a viscosidade da água. Esta hipótese leva a uma simplificação no esquema de dispersão, eliminando a inter-dependência entre velocidades, equações de estado e concentração. Desse modo, o procedimento de resolução se resume a:

1. resolver a equação de fluxo (eq. (II-5)) em termos das cargas piezométricas;
2. determinar as velocidades da mistura através das equações de Darcy (eq. (II-8));

3. determinar, a partir das velocidades, os coeficientes de dispersão (eq. (II-17)); e
4. resolver a equação de transporte de massa (eq. (II-10)), obtendo-se a nova distribuição de concentração do poluente.

Uma vez que os aquíferos apresentam condições de contorno complexas e propriedades que variam de ponto a ponto, não há possibilidade de se resolver diretamente o esquema de dispersão, sendo necessário recorrer a métodos numéricos. Neste estudo optou-se pela metodologia de diferenças finitas, por ser ele mais simples e fornecer resultados suficientemente precisos para os problemas de poluição de água subterrânea.

Tendo em vista as conclusões do capítulo III, que indicam o método das Características como o mais adequado para tratar a equação de transporte de massa, foi selecionado o modelo matemático que Konikow e Bredihoeft (1978) desenvolveram para o U.S. Geological Survey (EUA). Este modelo segue exatamente o procedimento de resolução do esquema de dispersão, indicado acima, usando a metodologia de diferenças finitas. A equação de fluxo é resolvida através do *procedimento implícito de direções alternadas (ADIP)*, enquanto a equação de transporte de massa o é pelo *método das Características*.

As descrições dos métodos numéricos e do programa de computador, que se seguem, foram baseadas, principalmente, em Konikow e Bredehoeft (1978).

IV.2 MÉTODOS NUMÉRICOS

Os métodos numéricos exigem que a área de interesse seja subdividida em pequenas áreas (células ou elementos). O modelo desenvolvido por Konikow e Bredehoeft utiliza uma malha re-tangular, uniformemente espaçada, onde os nós são definidos no centro de cada célula. Para a delimitação da área de interesse o modelo exige que a mesma seja circundada por células de flu-xo nulo — impõem-se transmissibilidade zero.

IV.2.1 Discretização da Equação de Fluxo

Pinder e Bredehoeft (1968) mostram que se os eixos de coordenadas estão alinhados com as direções principais do ten-sor de transmissibilidade, então a equação (II-5) pode ser apro-ximada pela seguinte equação implícita de diferenças finitas:

$$\begin{aligned}
 & T_{xx}(i-1/2, j) \left[\frac{h_{i-1, j}^{n+1} - h_{i, j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right] + T_{xx}(i+1/2, j) \left[\frac{h_{i+1, j}^{n+1} - h_{i, j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right] + \\
 & + T_{yy}(i, j-1/2) \left[\frac{h_{i, j-1}^{n+1} - h_{i, j}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right] + T_{yy}(i, j+1/2) \left[\frac{h_{i, j+1}^{n+1} - h_{i, j}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right] = \\
 & = S \left[\frac{h_{i, j}^{n+1} - h_{i, j}^n}{\Delta t} \right] + \frac{q\omega(i, j)}{\Delta x \Delta y} - \frac{Kz}{m} \left[H_s(i, j) - h_{i, j}^{n+1} \right] \quad (IV-1)
 \end{aligned}$$

onde:

i, j, n - índices nas dimensões x e y e no tempo t ;

$\Delta x, \Delta y, \Delta t$ - incrementos nas dimensões x e y e no tempo t ;
e

$qw(i, j)$ - vazão de retirada ou de recarga no nó (i, j)

$$\left[L^3 T^{-1} \right].$$

A equação de diferenças finitas (eq. (IV-1)) no modelo é resolvida numericamente usando um procedimento implícito de direções alternadas (ADIP), cuja aplicação à equação (IV-1) foi detalhadamente apresentada por Pinder e Bredehoeft (1968), Prickett e Lonquist (1971) e Trescott et alii (1976).

Depois que a distribuição de carga hidráulica para um dado intervalo de tempo é calculada, a velocidade do fluxo subterrâneo é calculada em cada nó, usando um esquema explícito de diferenças finitas para a equação (II-8). Assim, a velocidade intersticial na direção x no nó (i, j) pode ser obtida por:

$$U_x(i, j) = \frac{K_{xx}(i, j)}{\phi} \cdot \frac{(h_{i-1, j}^{n+1} - h_{i+1, j}^{n+1})}{2\Delta x} \quad (IV-2)$$

A velocidade na direção x também pode ser calculada na fronteira entre o nó (i, j) e o nó $(i+1, j)$, usando-se a seguinte equação:

$$U_x(i+1/2, j) = \frac{K_{xx}(i+1/2, j)}{\phi} \cdot \frac{(h_{i, j}^{n+1} - h_{i+1, j}^{n+1})}{\Delta x} \quad (IV-3)$$

onde a condutividade hidráulica na fronteira é calculada como a média harmônica das condutividades hidráulicas nos dois nós adjacentes.

Expressões similares às equações (IV-2) e (IV-3) são usadas para calcular a velocidade na direção y nas posições (i,j) e $(i,j+1/2)$.

IV.2.2 Discretização da Equação de Transporte de Massa

A idéia básica do método das Características é resolver um sistema equivalente de equações diferenciais ordinárias, ao invés de resolver a equação (II-10) diretamente.

Considerando-se a espessura saturada como uma variável, e expandindo-se o termo convectivo, pode-se reescrever a equação (II-10) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} (b D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - U_x \frac{\partial C}{\partial x} - U_y \frac{\partial C}{\partial y} + \\ & + \frac{1}{\phi b} \left[C \left(S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \phi \frac{\partial b}{\partial t} \right) - C' W \right] \end{aligned} \quad (IV-4)$$

Por outro lado, a derivada total da concentração, que corresponde à taxa de variação da concentração, observada sob um referencial lagrangeano, é dada por:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} + \frac{\partial C}{\partial y} \cdot \frac{dy}{dt} \quad (\text{IV-5})$$

Pode-se observar que há uma estreita relação entre as equações (IV-4) e (IV-5). Identificando-se:

$$\frac{dx}{dt} = U_x \quad (\text{IV-6})$$

$$\frac{dy}{dt} = U_y \quad (\text{IV-7})$$

e, substituindo a equação (IV-4) na equação (IV-5), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} (b D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) + \frac{1}{\phi b} \left[C \left(S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \right. \right. \\ \left. \left. - \phi \frac{\partial b}{\partial t} \right) - C' W \right] \end{aligned} \quad (\text{IV-8})$$

Considerando (IV-6), (IV-7) e (IV-8), obtém-se um sistema de três equações diferenciais ordinárias cujas soluções são dadas por:

$$x = x(t); \quad y = y(t); \quad e \quad C = C(t) \quad (\text{IV-9})$$

Essas soluções são chamadas de curvas características da equação (IV-4).

Uma vez conhecidas as soluções das equações (IV-6) a (IV-8), é possível obter-se a solução da equação (IV-4), se-

guindo-se as curvas características. No método das Características um conjunto de pontos móveis é introduzido na malha estacionária de discretização espacial. Cada ponto móvel corresponde a uma curva característica e os valores de x , y e C podem, então, ser obtidos para cada característica, pois cada ponto tem associado a si uma posição, que varia em função do campo de velocidades dentro da malha estacionária, e uma concentração.

O procedimento de cálculo pode ser sumarizado em cinco itens:

1. Um certo número de pontos móveis deve ser colocado dentro de cada célula da malha de diferenças finitas, de modo a formar um conjunto de pontos uniformemente distribuídos dentro da área de interesse. Quatro a nove pontos por célula mostram-se suficientes para os problemas bidimensionais, em geral. A posição de cada ponto é dada por coordenadas (x, y) , sendo atribuída inicialmente a cada ponto móvel a concentração associada ao nó da célula.
2. Em cada intervalo de tempo os pontos são deslocados de uma distância proporcional à velocidade do fluxo na posição antiga e ao incremento de tempo Δt , de modo que:

$$X_P^{n+1} = X_P^n + \Delta t U_x(X_P^n, Y_P^n); \quad e \quad (IV-10)$$

$$Y_P^{n+1} = Y_P^n + \Delta t U_y(X_P^n, Y_P^n) \quad (IV-11)$$

As velocidades U_x e U_y na posição de qualquer partícula são calculadas para o tempo $n+1$ através de interpolação bilinear sobre metade da área de uma célula, usando as velocidades calculadas nos nós adjacentes e nas fronteiras de cada célula.

3. Uma vez que todos os pontos foram movimentados, a cada nó é temporariamente associada a concentração média dos pontos móveis que se encontram nessa célula. Essa concentração média é denotada por $\bar{C}_{i,j}^{*(n+1)}$.

Essa distinção faz-se necessária porque essa concentração média representa tão somente o transporte convectivo para o novo tempo $(n+1)$.

4. As variações na concentração devidas à dispersão hidrodinâmica, fontes de fluido e alterações na espessura saturada são calculadas, usando-se uma aproximação explícita para a equação (IV-8):

$$\Delta C_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{b} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (b D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j}) \right] +$$

$$+ \frac{\Delta t}{\phi b} \left[C \left(S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \phi \frac{\partial b}{\partial t} \right) - C' W \right] \quad (IV-12)$$

O primeiro termo da equação (IV-12) é responsável pela dispersão hidrodinâmica, enquanto o segundo é responsável por alterações de concentração devidas a uma fonte externa de fluido ou a variações na espessura saturada do aquífero.

Devido à dificuldade em se calcular gradientes de concentração para um grande número de pontos móveis, a variação de concentração indicada pela equação (IV-8) é obtida para cada nó da malha, ao invés de ser calculada diretamente para cada ponto móvel. Desse modo, a variação total da concentração em qualquer curva característica (ou qualquer ponto móvel) é relacionada às variações de concentração em cada nó durante um intervalo de tempo.

Levando em consideração que os processos de transporte convectivo, dispersão hidrodinâmica e misturamento devido a injeção de fluido ocorrem contínua e simultaneamente e tendo em vista minimizar as limitações impostas pelo cálculo explícito das concentrações nodais, é utilizado neste modelo um procedimento explícito em duas etapas. A equação (IV-12) é resolvida em cada nó levando em consideração pesos iguais para os gradientes de concentração obtidos no tempo (n) e no tempo (n+1), de modo que a equação (IV-12) pode ser assim reescrita:

$$\begin{aligned} \Delta C_{i,j}^{n+1} = & \frac{0,5\Delta t}{b} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (bD_{ij} \frac{\partial C^n}{\partial x_j}) + \frac{C^n}{\phi} (S \frac{\partial h}{\partial t} + \right. \\ & + W - \phi \frac{\partial b}{\partial t}) - \frac{C'W}{\phi} \left. \right] + \frac{0,5\Delta t}{b} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (bD_{ij} \frac{\partial \hat{C}^{*(n+1)}}{\partial x_j} + \right. \\ & + \frac{\hat{C}^{*(n+1)}}{\phi} (S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \phi \frac{\partial b}{\partial t}) - \frac{C'W}{\phi} \left. \right] \end{aligned} \quad (IV-13)$$

onde C^n refere-se às concentrações nodais ao fim do intervalo anterior e $C^{*(n+1)}$ representa a concentração nodal intermediária (item 3 do procedimento), após a movimentação dos pontos móveis para o tempo $(n+1)$. O termo de dispersão da equação (IV-12) pode ser desdobrado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (bD_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) &= \frac{\partial}{\partial x} (bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y}) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} (bD_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + bD_{yx} \frac{\partial C}{\partial x}) \end{aligned} \quad (IV-14)$$

obtendo-se as seguintes discretizações para os termos do segundo membro da equação (IV-14):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[bD_{xx}^{(i+1/2,j)} \cdot (C_{i+1,j} - C_{i,j}) - bD_{xx}^{(i-1/2,j)} \cdot (C_{i,j} - C_{i-1,j}) \right] + \\ &+ \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left[bD_{xy}^{(i+1/2,j)} \cdot (C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1} - C_{i,j-1} - C_{i+1,j-1}) - bD_{xy}^{(i-1/2,j)} \cdot (C_{i-1,j+1} + C_{i,j+1} - C_{i-1,j-1} - C_{i,j-1}) \right] \end{aligned} \quad (IV-15)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y} \left(b D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + b D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) &= \frac{1}{(\Delta y)^2} \left[b D_{yy}^{(i,j+1/2)} \cdot \right. \\
&\cdot (C_{i,j+1} - C_{i,j}) - b D_{yy}^{(i,j-1/2)} \cdot (C_{i,j} - C_{i,j-1}) \left. \right] + \\
&+ \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left[b D_{yx}^{(i,j+1/2)} \cdot (C_{i+1,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j} - \right. \\
&- C_{i-1,j+1}) - b D_{yx}^{(i,j-1/2)} \cdot (C_{i+1,j-1} + C_{i+1,j} - \\
&- C_{i-1,j-1} - C_{i-1,j}) \left. \right] \quad (IV-16)
\end{aligned}$$

A dedução das equações (IV-15) e (IV-16) encontram-se no Apêndice C. O segundo termo da equação (IV-12) é discretizado na forma:

$$\begin{aligned}
C \left(S \frac{\partial h}{\partial t} + W - \frac{\partial b}{\partial t} \right) - C'W &= C_{i,j}^n \left[S \left(\frac{h_{i,j}^{n+1} - h_{i,j}^n}{\Delta t} \right) + W_{i,j}^{n+1} - \right. \\
&- \phi \left(\frac{b_{i,j}^{n+1} - b_{i,j}^n}{\Delta t} \right) \left. \right] - \left[C_{i,j}^{n+1} \cdot W_{i,j}^{n+1} \right] \quad (IV-17)
\end{aligned}$$

Desse modo a discretização da equação (IV-13) é obtida substituindo-se, adequadamente, as equações (IV-15) a (IV-17) na equação (IV-13). A espessura saturada b é calculada no tempo $(n+1)$: $b_{i,j}^{n+1}$.

Finalmente, a concentração de cada nó e de cada ponto móvel pode ser calculada (item 5).

5. A concentração de cada nó é dada, no tempo (n+1), por:

$$C_{i,j}^{n+1} = \bar{C}_{i,j}^{*(n+1)} + \Delta C_{i,j}^{n+1} \quad (\text{IV-18})$$

e a concentração dos pontos móveis que se encontram na célula (i,j) é dada por:

$$C_p^{n+1} = C_p^n + \gamma \cdot \Delta C_{i,j}^{n+1} \quad (\text{IV-19})$$

onde

$$\left\{ \begin{array}{ll} \gamma = 1,0 & \text{se } \Delta C_{i,j}^{n+1} \geq 0; \text{ ou} \\ \gamma = C_p^n / \bar{C}_{i,j}^{*(n+1)} & \text{se } \Delta C_{i,j}^{n+1} < 0 \end{array} \right.$$

Esse critério, assumido para se determinar as concentrações dos pontos móveis, visa evitar que algum ponto apresente concentração negativa, quando há um decréscimo de concentração na célula.

IV.2.3 Critérios de Estabilidade

Como a solução numérica da equação de dispersão é explícita, ela tem associada a si um certo número de critérios de estabilidade, os quais podem exigir que o intervalo de tempo seja subdividido em intervalos menores, para resolver acuradamente a equação de transporte de massa.

Reddell e Sunada (1970) mostram que o esquema de diferenças finitas explícito da equação (IV-14) exige, para ser estável, que:

$$\Delta t \leq \underset{\text{sobre a malha}}{\text{MIN}} \left[\frac{0,5}{\frac{D_{xx}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{yy}}{(\Delta y)^2}} \right] \quad (\text{IV-20})$$

Uma segunda restrição é colocada em relação ao fluido injetado com concentração diferente, representado pelo termo de fonte da equação (IV-17). A variação da concentração num nó que seja fonte de fluido não pode exceder a diferença entre a concentração da fonte ($C'_{i,j}$) e a concentração do aquífero ($C^n_{i,j}$). Konikow e Bredehoeft mostram que, para satisfazer essa condição, é necessário que:

$$\Delta t^{n+1} \leq \underset{\text{sobre a malha}}{\text{MIN}} \left[\frac{\phi b^{n+1}_{i,j}}{W^{n+1}_{i,j}} \right] \quad (\text{IV-21})$$

Uma terceira restrição envolve o movimento dos pontos móveis, calculados pelas equações (IV-10) e (IV-11). Estas equações constituem, na realidade, uma extrapolação linear das posições de cada ponto, que pode levá-los a se afastar bastante da linha de corrente a que pertenciam, quando o fluxo é curvilíneo. E isto gera um erro, tanto maior quanto maior for o intervalo de tempo. Para diminuir esse erro, restringe-se a máxima distância que um ponto pode mover-se num intervalo Δt , de modo que o máximo intervalo de tempo é dado por:

$$\Delta t \leq \frac{\gamma \Delta x}{(U_x)_{\text{máx}}} \quad (\text{IV-22.a})$$

$$\Delta t \leq \frac{\gamma \Delta y}{(U_y)_{\text{máx}}} \quad (\text{IV-22.b})$$

onde γ é a máxima distância relativa que um ponto pode mover-se dentro de uma célula ($0 \leq \gamma \leq 1,0$). Esse critério é suficiente também para evitar os problemas de dispersão numérica transversal mencionados no item III.4.4.

Caso o intervalo de tempo adotado seja maior que o obtido das equações (IV-20) a (IV-22), ele será subdividido em intervalos menores, que satisfaçam às restrições impostas.

IV.2.4 Condições Iniciais e de Contorno

Neste modelo foram incorporados dois tipos gerais de condições de fronteira: fluxo constante e carga constante.

Uma fronteira de fluxo constante pode ser usada para representar os fluxos que entram ou saem do aquífero, assim como injeções ou retiradas por poços. Os fluxos são associados aos nós de cada célula. Uma fronteira impermeável é um caso particular de fronteira de fluxo constante. O procedimento numérico usado neste modelo exige que a área de interesse seja circundada por fronteiras impermeáveis, definidas através do coeficiente de transmissibilidade que neste caso é nulo.

Uma fronteira de carga constante pode representar áreas do aquífero onde a carga não varia com o tempo, tais como áreas de recarga sujeitas a pressões hidráulicas. Neste modelo fronteiras de carga constante são simuladas pelo ajuste do termo de infiltração localizada (último termo da equação (IV-1)) nos nós apropriados. Isto é feito atribuindo-se um valor muito alto ($\sim 10^5 \text{ s}^{-1}$) ao coeficiente de infiltração (Kz/m), de modo que a carga naqueles nós, ao ser calculada implicitamente, coincida essencialmente com o valor de H_g , que nesse caso deve ser especificado como a carga constante desejada. A taxa de infiltração deverá igualar o fluxo requerido para manter a carga do aquífero naquela carga constante especificada.

Quando uma fronteira de fluxo constante ou de carga constante representa uma fonte, a concentração dessa fonte precisa ser fornecida.

Tendo em vista que o transporte sólido depende diretamente dos gradientes de concentração e das cargas hidráulicas que agem sobre o aquífero, é necessário especificá-las no início da simulação. As condições iniciais podem ser determinadas de dados de campo e/ou de prévias simulações. Deve-se notar que os resultados de simulação podem ser sensíveis a variações das condições iniciais.

IV.2.5 Balanço de Massas

O princípio de conservação de massas exige que a massa de soluto (ou contaminante) acumulada no aquífero seja igual à diferença entre a massa de soluto que entrou e a que saiu. Quando isso não acontece, a diferença entre essas duas quantidades, chamada massa residual (R_m), é uma medida da acurácia numérica da solução.

O modelo utiliza dois métodos para estimar o erro no balanço de massas, ambos baseados na massa residual, R_m :

$$R_m = \Delta M_d - \Delta M_a \quad (\text{IV-23})$$

onde:

ΔM_a - variação na massa acumulada do aquífero $[M]$; e

ΔM_d - diferença entre a massa que entrou e a que saiu $[M]$.

Os dois termos, ΔM_a e ΔM_d , são calculados pelas seguintes equações:

$$\Delta M_a = \sum_i \sum_j \left[b_{i,j} \phi \Delta x \Delta y (C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^0) \right] \quad (\text{IV-24.a})$$

onde $C_{i,j}^0$ é a concentração inicial de cada nó (i,j) , e

$$\Delta M_d = \sum_n \sum_i \sum_j \left[w_{i,j}^{n+1} \Delta x \Delta y \Delta t^{n+1} C_{i,j}^{n+1} \right] \quad (\text{IV-24.b})$$

O erro percentual (E) no balanço de massas é calculado primeiro por:

$$E_1 = \frac{R_m}{0,5 (\Delta M_a + \Delta M_d)} \times 100 \quad (\text{IV-25})$$

Esta é uma boa medida de acurácia da solução numérica quando os fluxos e a variação na massa acumulada são grandes. Entretanto, a equação (IV-25) não leva em consideração a massa inicial de soluto presente no aquífero. Se os fluxos de massa são muito pequenos em comparação com a massa inicial do soluto no aquífero, a equação (IV-25) pode indicar erros muito grandes, embora a solução numérica seja suficientemente acurada. O erro também pode ser calculado de uma segunda maneira, que leva em consideração a massa (M_o) inicialmente presente no aquífero:

$$E_2 = \frac{\Delta M_d - \Delta M_a}{M_o - \Delta M_d} \times 100 \quad (\text{IV-26})$$

A equação (IV-26) também é uma boa medida de acurácia, pois leva em consideração tanto fluxos de massas pequenos, quanto massas inicialmente pequenas de soluto no aquífero. Dependendo da situação, este modelo calcula tanto E_1 , quanto E_2 , ou ambos os índices.

IV.3 DESCRIÇÃO DO PROGRAMA DE COMPUTADOR

IV.3.1 Organização Geral

Um programa principal e oito subrotinas constituem o corpo deste modelo. O nome e o objetivo principal de cada um desses segmentos encontram-se resumidos na tabela IV-1.

Na figura IV-1 encontra-se esquematizado o fluxograma de todo o cálculo, de acordo com o procedimento descrito no item IV.1. É interessante observar que pode ser necessário movimentar os pontos móveis mais de uma vez, dentro do mesmo intervalo de tempo, de modo a satisfazer as condições de estabilidade do método.

A área do aquífero é discretizada em intervalos regulares Δx e Δy , definindo pequenas sub-áreas chamadas células (fig. (III-1)). Para se definir os limites do aquífero, o modelo exige que o mesmo seja circundado por células de transmissibilidade nula, representando fronteiras de fluxo nulo.

Em cada célula é possível especificar um poço de bombeamento ou recarga. Caso existam mais de um poço dentro da área de uma célula, o fluxo especificado para o nó desta célula deve representar a taxa líquida de recarga ou retirada de todos os poços nesta célula.

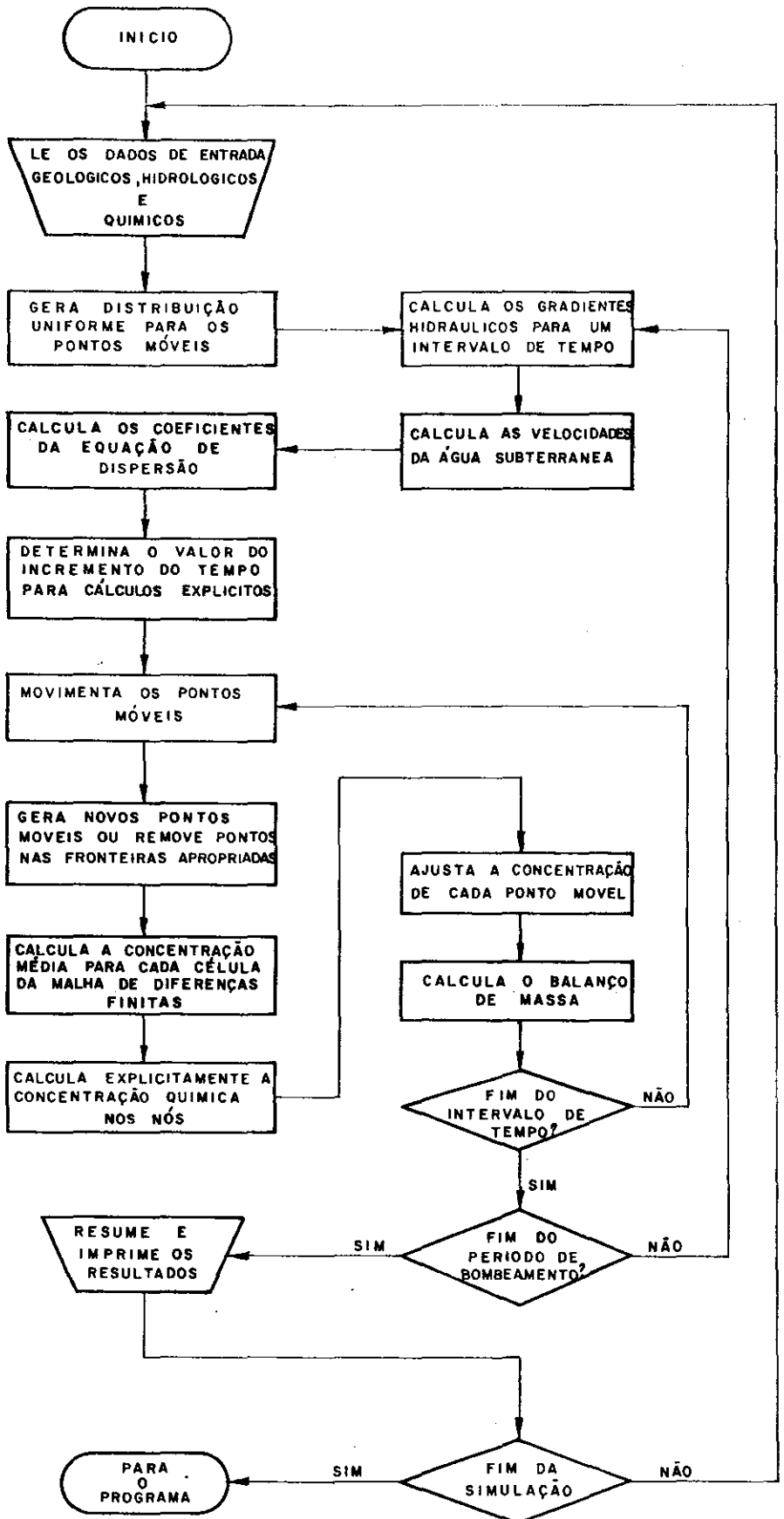


Figura IV-1 Fluxograma Simplificado do modelo, mostrando os principais passos do procedimento.

NOME	OBJETIVO
MAIN	- Controlar execução (programa principal);
PARLOD	- Leitura de dados e inicialização;
ITERAT	- Calcular cargas hidráulicas;
GENPT	- Gerar ou repor pontos móveis;
VELO	- Calcular gradientes hidráulicos, velocidades, coeficientes de dispersão e incrementos de tempo máximos para manter a solução estável;
MOVE	- Movimentar os pontos móveis;
CNCON	- Calcular variações na concentração e balanço de massas para o modelo de dispersão;
OUTPUT	- Imprimir distribuição de cargas hidráulicas e calcular balanço de massas para o modelo de fluxo;
CHMOT	- Imprimir concentração, balanço de massas e dados dos poços de observação.

TABELA IV-1 - SUBROTINAS QUE COMPÕEM O MODELO DE TRANSPORTE DE MASSA DE KONIKOW E BREDEHOEFT

O programa permite especificar alguns poços de observação, de modo que é possível acompanhar a flutuação do nível d'água e a variação da concentração em pontos estratégicos.

O período total de simulação pode ser subdividido em vários períodos de bombeamento, para levar em consideração mudanças nos padrões de poluição a que está sujeito o aquífero.

Um resumo dos dados necessários à operação do modelo

encontra-se no Apêndice D.

IV.3.2 Descrição das Subrotinas

SUBROTINA MAIN

O objetivo desta subrotina é controlar toda a sequência de execuções do programa. Subrotinas para leitura de dados, execução e impressão dos resultados são chamadas por MAIN.

SUBROTINA PARLOD

Todos os dados de entrada (descritos no Apêndice D) são lidos através da subrotina PARLOD (V. figura D-1). Esses dados definem os parâmetros de controle e de discretização espacial e temporal, as propriedades do aquífero, as condições iniciais e de contorno e os esforços hidráulicos a que está subme-tido o aquífero (bombeamentos, recargas e cargas hidráulicas). Esta subrotina ainda executa os seguintes cálculos: 1) determi-nação dos intervalos de tempo para o modelo de fluxo; 2) cálcu-lo das transmissibilidades nas fronteiras das células através da média harmônica entre os valores nos nós de duas células ad-jacentes; 3) ajuste das transmissibilidades para levar em conta efeitos de anisotropia; 4) cálculo dos parâmetros de iteração para resolver a equação de fluxo; e 5) verificação de possíveis inconsistências entre os dados de entrada. Todos os dados li-dos ou calculados são impressos ao fim da execução de PARLOD.

SUBROTINA ITERAT

Esta subrotina resolve um sistema de equações de diferenças finitas, geradas a partir da equação (II-5), usando um procedimento iterativo, implícito, de diferenças finitas, segundo o algoritmo de Thomas (von Rosenberg, 1969, pp. 113). Assume-se que os cálculos convergiram quando a máxima diferença entre as cargas nos nós de cada célula calculadas por linhas e por colunas é menor que uma tolerância especificada.

Este modelo de fluxo assume que a transmissibilidade do aquífero é independente da carga hidráulica (ou da profundidade saturada) e permanece constante com o tempo. Caso esta hipótese não seja válida para um particular aquífero, o algoritmo apresentado nesta subrotina deverá ser modificado. Todos os parâmetros necessários ao cálculo da carga hidráulica são definidos como variáveis de dupla precisão.

Segundo Konikow e Bredehoeft, o procedimento implícito, iterativo de direções alternadas usado para resolver a equação de diferenças finitas não é, necessariamente, a melhor técnica para todos os problemas. Por exemplo, pode ser difícil obter-se, com esse procedimento, soluções para os casos de fluxo permanente quando nós internos à malha tem transmissibilidade zero, ou quando as transmissibilidades são altamente anisotrópicas. Nestes casos recomenda-se um procedimento fortemente implícito, como o sugerido por Trescott, Pinder e Larson (1976), para substituir o algoritmo utilizado na subrotina ITERAT.

SUBROTINA GENPT

O objetivo principal desta subrotina é gerar uma distribuição uniforme de pontos móveis por sobre toda a malha de diferenças finitas. Isto é feito no início dos cálculos, ou então, num tempo intermediário, quando várias células estão vazias de partículas. Neste segundo caso, o programa tenta observar uma aproximação dos gradientes de concentração dentro de cada célula.

O programa permite a colocação de quatro, cinco, oito ou nove pontos móveis por célula. Naturalmente, cada opção irá resultar numa geometria e densidades diferentes para os pontos móveis. Os padrões mais uniformes são obtidos quando se adota quatro ou nove pontos por célula.

Devido à necessidade de se introduzir pontos em nós que são fonte de fluido, ou de retirá-los quando os nós são sorvedouros, uma matriz reserva (chamada LIMBO) contém pontos que podem ser acrescentados mais tarde à malha, bem como tem espaço para guardar partículas que são retiradas nos sorvedouros ou fronteiras de fluxo.

SUBROTINA VELO

Três são os objetivos desta subrotina. Primeiro, ela calcula as velocidades nos nós e nas fronteiras de cada célula, resolvendo as equações (IV-2) e (IV-3). Segundo, calcula os

coeficientes de dispersão, D_{xx} , D_{yy} , D_{xy} e D_{yx} , nas fronteiras de cada célula, de acordo com as equações (II-17.a) a (II-17.c). E terceiro, ela calcula o número mínimo de movimentos dos pontos móveis, para se completar um intervalo de tempo estipulado, de modo a satisfazer os critérios de estabilidade.

SUBROTINA MOVE

Esta subrotina é a maior e, talvez, a mais complicada. Sua única função é mover os pontos móveis, de acordo com as equações (IV-10) e (IV-11). As complexidades surgem, principalmente, devido ao tratamento que deve ser dado aos pontos móveis em diferentes tipos de condições de fronteira.

Se um nó representa uma fonte ou um sorvedouro, pontos móveis precisam, respectivamente, ser criados ou destruídos nestas células. Recargas ou retiradas por infiltração difusiva (representadas pela matriz RECH). não apresentam áreas de fluxo fortemente divergente ou convergente, sendo desnecessário criar ou destruir pontos móveis nesses nós.

A presença de uma fronteira de carga hidráulica constante é testada através do parâmetro de infiltração localizada (VPRM) em cada nó: se $VPRM > 0,09$ o programa assume que o nó representa uma condição de carga constante, sendo tratado como fonte ou sorvedouro. A definição de fonte ou sorvedouro é feita através da diferença entre a carga do aquífero e a carga externa ao aquífero (carga na camada semi-permeável).

SUBROTINA CNCON

Esta subrotina calcula a variação de concentração em cada nó e em cada ponto móvel, de acordo com a equação (IV-13).

Ela verifica o coeficiente de armazenamento para determinar se o aquífero é confinado ou não. Se $S < 0,005$, o aquífero é confinado e $\partial b / \partial t = 0$. Se $S \geq 0,005$, o modelo assume que $\partial b / \partial t = \partial h / \partial t$.

Ela verifica, também, se o número de células vazias de pontos móveis é superior a um certo limite (NZCRIT). Caso o seja, os pontos móveis são regenerados nas mesmas posições iniciais, antes que se passe ao próximo intervalo de tempo.

Nesta subrotina calcula-se, ainda, o balanço de massas para o soluto. Considera-se que a concentração nos nós de evasão de fluido é igual à concentração do nó calculada no tempo n (tempo prévio).

SUBROTINA OUTPUT

Esta subrotina imprime os resultados dos cálculos do modelo de fluxo: 1) a nova matriz de carga hidráulica; 2) um mapa numérico dos valores das cargas; e 3) um mapa de rebaixamento do nível d'água.

Ela calcula o balanço de massas para o modelo de fluxo e estima a precisão dos cálculos desse modelo. O balanço de

massas é feito de maneira acumulativa, desde o tempo inicial, sendo considerado também para os fluxos dentro de um intervalo de tempo.

SUBROTINA CHMOT

Esta subrotina imprime os resultados dos cálculos do modelo de dispersão: 1) mapas de concentração; 2) variação nas concentrações desde as condições iniciais; e 3) resultados do balanço acumulativo de massas para o soluto (poluente).

Ela verifica a acurácia dos resultados para o soluto e imprime ainda os dados de concentração e carga hidráulica relativos a cada poço de observação.

IV.4 VERIFICAÇÃO UNIDIMENSIONAL PARA O MODELO DE KONIKOW-BREDEHOEFT

O objetivo deste item é verificar o desempenho do modelo de Konikow-Bredehoeft na resolução tanto da equação de fluxo quanto da equação de transporte de massa.

Os dados relativos à dispersão são os mesmos que foram utilizados nas comparações unidimensionais dos métodos numéricos (item III.3) e encontram-se resumidos na tabela IV-2.

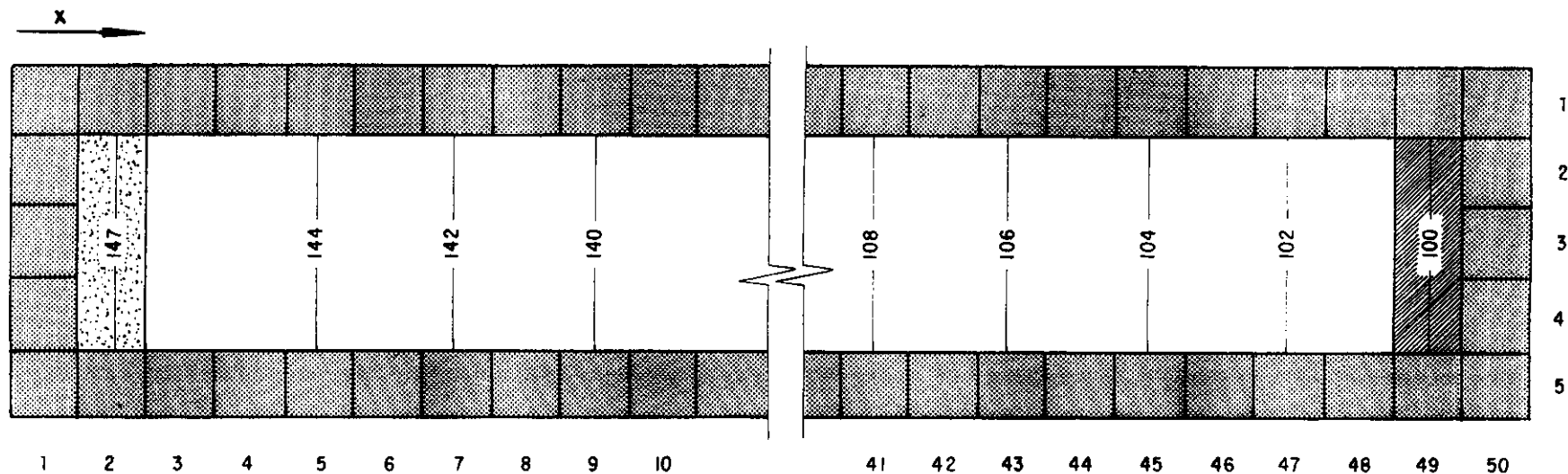
Para se simular uma região de 1x48 células, há necessi

dade de se ter, no mínimo, 3 linhas de 50 células cada, de modo a se ter um contorno de células de fluxo nulo (fronteira) em torno da região de interesse. Entretanto, essa malha não apresentou convergência no cálculo das cargas piezométricas, devido à proximidade de duas fronteiras de fluxo. Para se contornar esse problema, foi necessário utilizar uma malha de 5x50 células, definindo uma região de 3x48 células (fig. IV-2). As células de $i = 2$ representam fonte de contaminantes, sendo associada à fronteira de jusante dessas células a posição $x = 0$.

As cargas piezométricas foram arbitrariamente fixadas, de modo que a variação de carga entre células fosse de $\Delta H = 1,0$ cm. Para a fronteira de jusante, $H_J = 100$ cm e para a de montante, $H_M = 147$ cm.


Conhecendo-se a velocidade, $U = 0,01411$ cm/s, e impondo uma porosidade, $\phi = 0,34$, obtém-se a permeabilidade para este aquífero hipotético, a partir da lei de Darcy: $K = 0,01828$ cm/s.


Para se verificar a eficiência do algoritmo de resolução da equação de fluxo, foram fornecidas ao modelo apenas as cargas piezométricas das fronteiras, assumindo inicialmente o valor zero para as cargas no interior do aquífero. Os valores das cargas piezométricas convergiram após poucas iterações (35) e as velocidades e coeficientes de dispersão calculados conferem exatamente com o esperado.



$K = 0,01828 \text{ cm/s}$
 $D_L = 2,94 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$
 $\alpha_L = 0,2084 \text{ cm}$
 $U = 0,01411 \text{ cm/s}$
 $\phi = 0,34$
 $b = 1,0 \text{ cm}$
 $\Delta x = \Delta y = 3,81 \text{ cm}$

 - Fronteira de fluxo nulo

 - Fronteira de carga constante

 - Fronteira de carga constante e fonte de poluição

 140 — Carga piezométrica calculada

FIGURA IV-2 Esquema Bidimensional para Verificação Unidimensional do Modelo de Dispersão de Konikow - Bredehoeft.

Velocidade intersticial	$U = 0,01411 \text{ cm/s}$
Coeficiente de permeabilidade	$K = 0,01828 \text{ cm/s}$
Profundidade saturada	$b = 1,0 \text{ cm}$
Coeficiente de acumulação	$S = 0,0$
Porosidade efetiva	$\phi = 0,34$
Dispersividade longitudinal	$\alpha_L = 0,2084 \text{ cm}$
Relação entre as dispersividades transversal e longitudinal	$\alpha_T/\alpha_L = 0,0$
Concentração do contaminante na fonte	$c_o = 1.000 \text{ mg/l}$
Concentração inicial no aquífero	$c = 0,0$
Incremento na direção x	$\Delta x = 3,81 \text{ cm}$
Incremento na direção y	$\Delta y = 3,81 \text{ cm}$
Número de pontos móveis por célula	$NPTMOV = 9$
Máxima distância relativa que um ponto pode mover-se	$CELDIS = 0,50$
Tempo total de simulação	$t = 6.500 \text{ s}$
Intervalo de tempo	$\Delta t = 100 \text{ s}$

TABELA IV-2 - RESUMO DOS DADOS UTILIZADOS NA VERIFICAÇÃO UNIDIMENSIONAL DO MODELO DE KONIKOW-BREDEHOEFT

Os resultados obtidos quanto à evolução da frente de dispersão mostram que os pontos numéricos se ajustam muito bem à solução analítica. O gráfico IV-1 apresenta os resultados obtidos para o tempo $t = 6.500 \text{ s}$ ($T = 0,50$), considerando os dados utilizados no item III.3 ($Br = 877,7$, $\Delta T = 0,0077154$ e $NX = 48$).

Os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ obtidos são pequenos, evidenciando um bom desempenho do modelo. A tabela IV-3 apresenta os resultados, quanto a $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$, obtidos pelo método das Características e pelo modelo de Konikow-Bredenhoeft, para o caso unidimensional.

MÉTODO	NX	$\Delta_{\text{máx}}$	$\Sigma\Delta$	FONTE
CARACTERÍSTICAS	48	0,081	0,211	Tab.III-1
	47	0,018	0,063	Tab.III-4
Konikow-Bredenhoeft	48	0,020	0,078	-

TABELA IV-3 - VALORES DOS DESVIOS $\Delta_{\text{máx}}$ E $\Sigma\Delta$ OBTIDO PARA O MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS E PARA O MODELO DE KONIKOW-BREDEHOEFT

De acordo com as conclusões do item III.3, o melhor resultado para o método das Características ocorre quando o ponto de 50% de concentração cai no centro de uma célula, num dado tempo t . Isto é o que se observa quando se diminui NX de 48 para 47: os desvios $\Delta_{\text{máx}}$ e $\Sigma\Delta$ diminuem sensivelmente.

Já o modelo de Konikow-Bredenhoeft apresentou, para NX = 48, desvios muito próximos daqueles obtidos inicialmente para NX = 47. Essa melhoria de desempenho é devida a um cálculo mais realista do transporte dispersivo, implementado por Konikow-Bredenhoeft. Originalmente este cálculo era feito integralmen-

te após a movimentação dos pontos móveis (transporte convectivo). O modelo, por outro lado, efetua este cálculo em duas etapas: na primeira assume que o transporte dispersivo, durante meio intervalo de tempo, é devido aos gradientes de concentrações obtidas no fim do intervalo anterior; na segunda etapa, o transporte dispersivo é devido aos gradientes de concentrações originados só pelo transporte convectivo (após movimentação dos pontos móveis) correspondente a este intervalo de tempo. Este segundo cálculo é feito, também, sobre meio intervalo de tempo. A concentração da célula, ao fim do intervalo de tempo, será dada pela parcela do transporte convectivo mais estas duas parcelas do transporte dispersivo. Este procedimento tende a apresentar um maior grau de continuidade para a solução numérica, entre um e outro intervalo de tempo, atenuando a variação dos desvios ao longo das iterações verificadas no gráfico III-7.

IV.5 VERIFICAÇÃO BIDIMENSIONAL PARA O MODELO DE KONIKOW-BREDEHOEFT

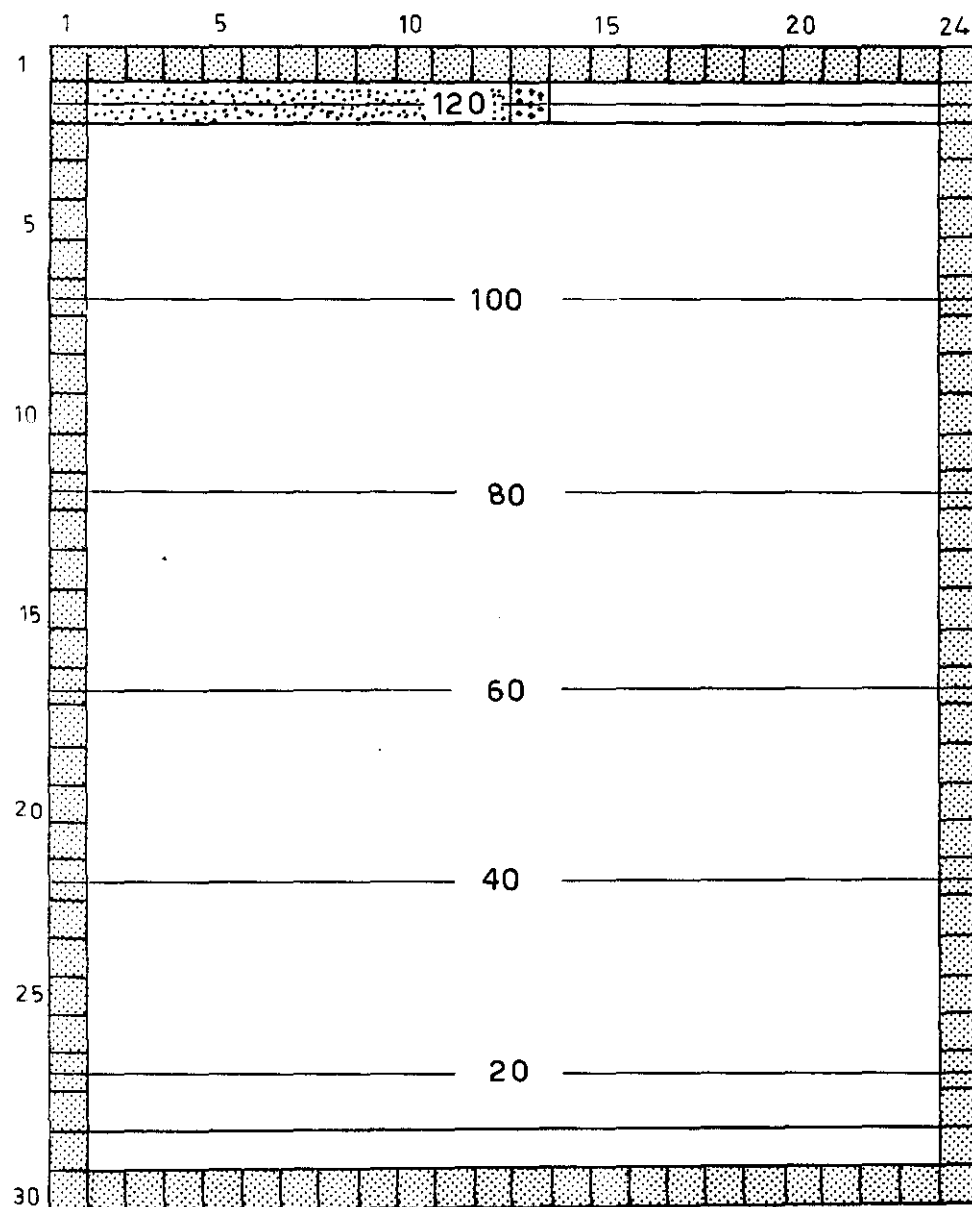
A verificação bidimensional para o modelo de Konikow-Bredehoeft foi feita para o caso apresentado na figura III-6, cujos dados encontram-se resumidos na tabela IV-4.





Para a discretização, foi adotada uma malha retangular de 30x24 células, definindo uma região de 28x22 células. A primeira e última linhas representam fronteiras de fluxo nulo. A segunda linha contém células de concentração constante para simular as condições de contorno em $x = 0$. O aquífero hipotético

é representado por uma malha retangular de 27x22 células, onde as duas últimas linhas simulam uma extensão do aquífero de modo a garantir as condições de fronteira de jusante ($x = \ell_x$) que são não-limitadas (Fig. IV-3).

Velocidade intersticial	$U = 0,1 \text{ cm/s}$
Coeficiente de permeabilidade	$K = 0,01 \text{ cm/s}$
Profundidade saturada	$b = 1,0 \text{ cm}$
Coeficiente de acumulação	$S = 0,0$
Porosidade efetiva	$\phi = 1,0$
Dispersividade longitudinal	$\alpha_L = 0,1$
Relação entre as dispersividades transversal e longitudinal	$\alpha_T/\alpha_L = 0,1$
Concentração do contaminante na fonte	$c_o = 1.000 \text{ mg/l}$
Concentração inicial no aquífero	$c = 0,0$
Incremento na direção x	$\Delta x = 0,4 \text{ cm}$
Incremento na direção y	$\Delta y = 0,2 \text{ cm}$
Número de pontos móveis por célula	$NPTMV = 4$
Máxima distância relativa que um ponto pode mover-se	$CELDIS = 0,251$
Tempo total de simulação	$t = 200 \text{ s}$
Intervalo de tempo	$\Delta t = 1 \text{ s}$

TABELA IV-4 - RESUMO DOS DADOS UTILIZADOS NA VERIFICAÇÃO BIDIMENSIONAL DO MODELO DE KONIKOW-BREDEHOEFT



-  Fronteira de fluxo nulo
-  Fronteira de carga constante
-  Fronteira de carga constante e fonte de poluição ($c=c_0$)
-  Fronteira de carga constante e fonte de poluição ($c=c_0/2$)

— 40 — Carga piezométrica

$$U = 0,1 \text{ cm/s}$$

$$D_L = 0,01 \text{ cm/s}$$

$$D_T = 0,001 \text{ cm/s}$$

$$K = 0,01 \text{ cm/s}$$

$$\phi = 1,0$$

$$b = 1,0 \text{ cm}$$

$$\Delta x = 0,4 \text{ cm}$$

$$\Delta y = 0,2 \text{ cm}$$

FIGURA IV-3 Verificação Bidimensional do Modelo de Konikow-Bredehoeft para os dados da figura III-6

Para a simulação da equação de fluxo foram arbitradas cargas piezométricas na fronteira de montante, $H_M = 120$ cm, e na fronteira de jusante, $H_J = 12$ cm, fornecendo um gradiente $i = \Delta H / \Delta x = 10$. Assumindo para a porosidade o valor $\phi = 1,0$ e conhecendo-se a velocidade intersticial $U = 0,1$ cm/s, obtém-se a permeabilidade através da lei de Darcy, $K = 0,01$ cm/s. Foram fornecidos ao modelo apenas os valores das cargas piezométricas nas fronteiras, assumindo inicialmente zero para as cargas no interior do aquífero. Os cálculos convergiram em poucas iterações (40) e os valores obtidos para as velocidades conferem com o esperado.

Os resultados obtidos, quanto à evolução da frente de dispersão, estão apresentados nos gráficos IV-2 e IV-3, para os tempos de 50 s e 100 s, respectivamente. O ajuste dos pontos numéricos é bom, confirmando os resultados encontrados no item III.5, para o método das Características. Quanto aos desvios, o modelo de Konikow-Bredehoeft apresentou, para $t = 50$ s, $\Delta_{\max} = 0,047$ e $\Sigma\Delta = 2,661$, superiores aos valores encontrados para o método das Características no item III.5 (gráficos III-29 e III-30) que são, respectivamente, 0,038 e 2,285. Esta pequena diferença pode ser atribuída às implementações que foram feitas no modelo de modo a torná-lo o mais geral possível.

Já para $t = 100$ s os resultados fornecidos pelo modelo apresentam pouca diferença em relação àqueles obtidos pelo método das Características bidimensional (gráficos III-29 e III-30). O modelo forneceu $\Delta_{\max} = 0,042$ e $\Sigma\Delta = 1,769$ contra $\Delta_{\max} = 0,037$ e $\Sigma\Delta = 1,410$ para o método das Características.

Esses resultados mostram o bom desempenho do modelo de Konikow-Bredehoeft frente a situações de acentuado transporte dispersivo ($Br_\ell = 100$). À medida que o número de Brenner aumenta, o processo de transporte de massa torna-se predominantemente convectivo e o método das Características tende a apresentar um melhor desempenho. Isto é o que se nota no gráfico IV-4, onde se apresentam os resultados obtidos pelo modelo de Konikow-Bredehoeft para $Br_\ell = 1.000$ ($\alpha_L = 0,01$). Esses resultados são muito bons, mostrando que a frente de dispersão na direção longitudinal é simulada com boa acurácia, embora ainda haja uma acentuada dispersão numérica transversal próxima à região de elevados gradientes transversais de concentração. Caso houvesse a componente U_y da velocidade intersticial, essa dispersão numérica seria, provavelmente, atenuada, uma vez que haveria transporte de massa transversal também convectivo, e não só dispersivo, como é o caso desse exemplo.

Pode-se, então, dizer que o Modelo de Konikow-Bredehoeft apresenta condições suficientes para simular o transporte de poluentes em águas subterrâneas (em geral, não é frequente, na prática, a ocorrência de elevados gradientes transversais de concentração, como descrito nesse exemplo). É recomendável, porém, um estudo mais detalhado desse problema, devido em grande parte ao uso da metodologia de diferenças finitas para simular o transporte de massa dispersivo, de modo a se melhorar a eficiência do modelo.

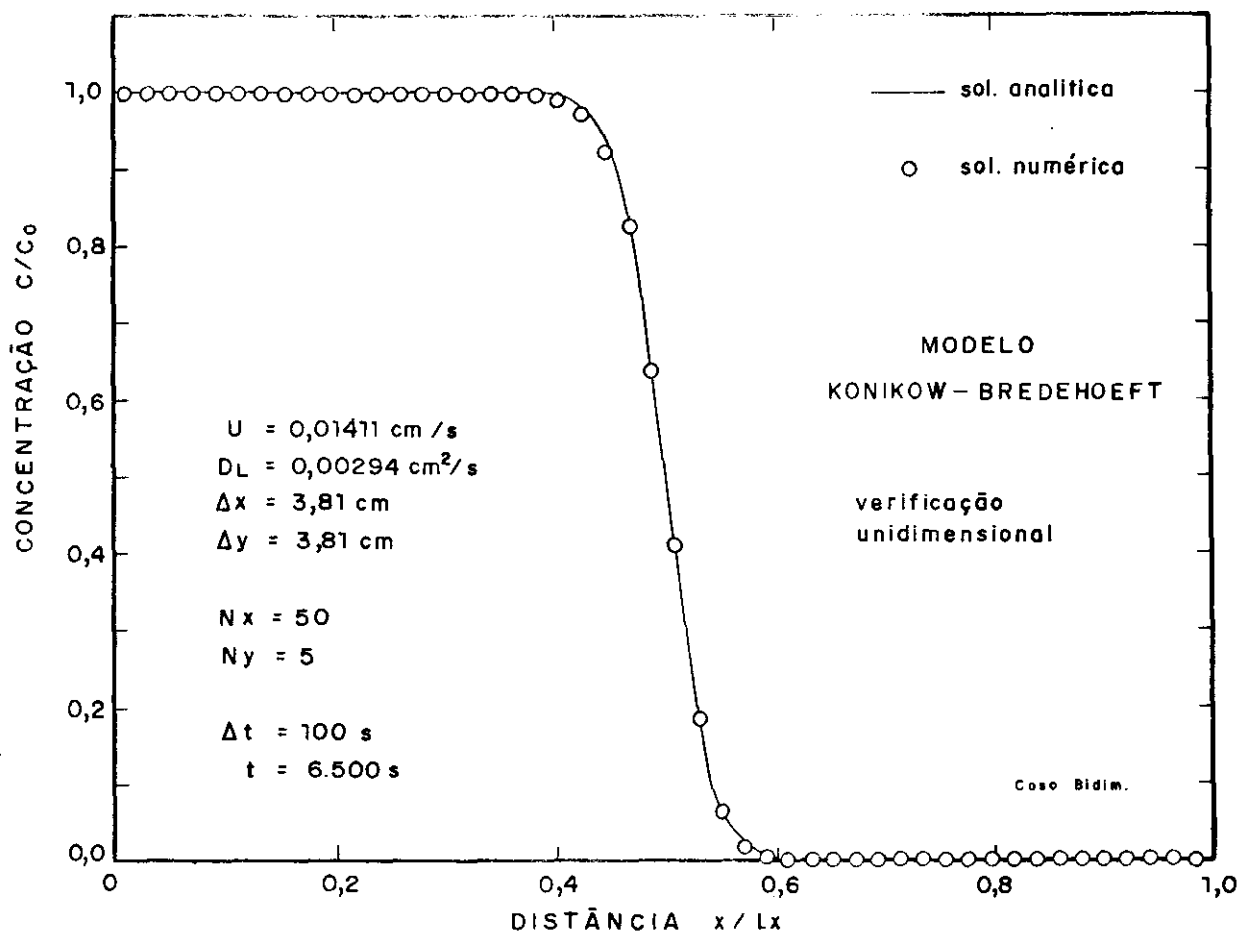


GRÁFICO IV-1 : Verificação unidimensional do modelo de Konikow - Bredehoeft para os dados apresentados no item III.4.2 ($Br = 877.7$, $\Delta t = 0,0077154$ e $N_x = 48$)

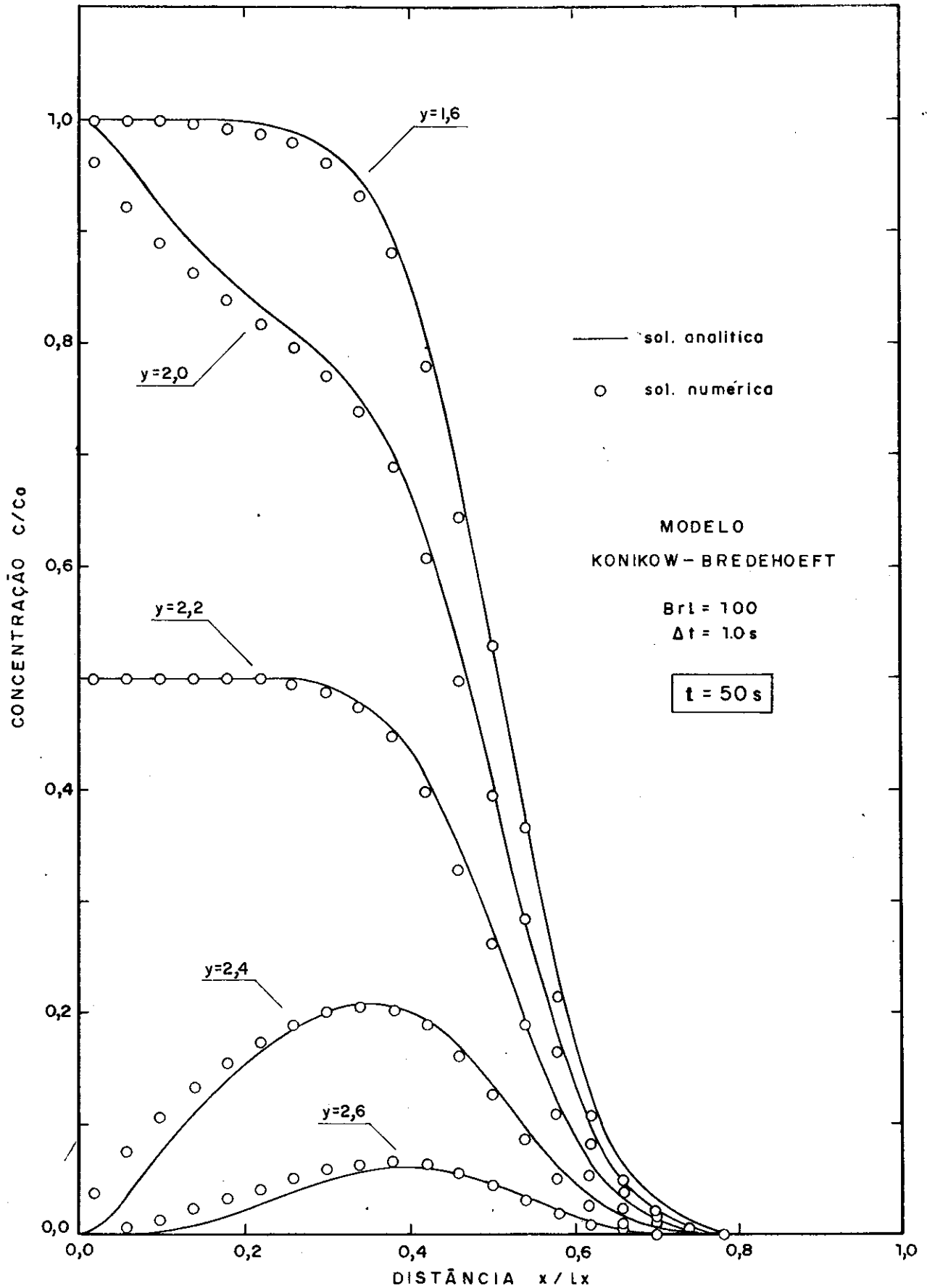


GRÁFICO IV-2 : Verificação bidimensional do modelo de Konikow - Bredehoeft, para os dados da figura III-6

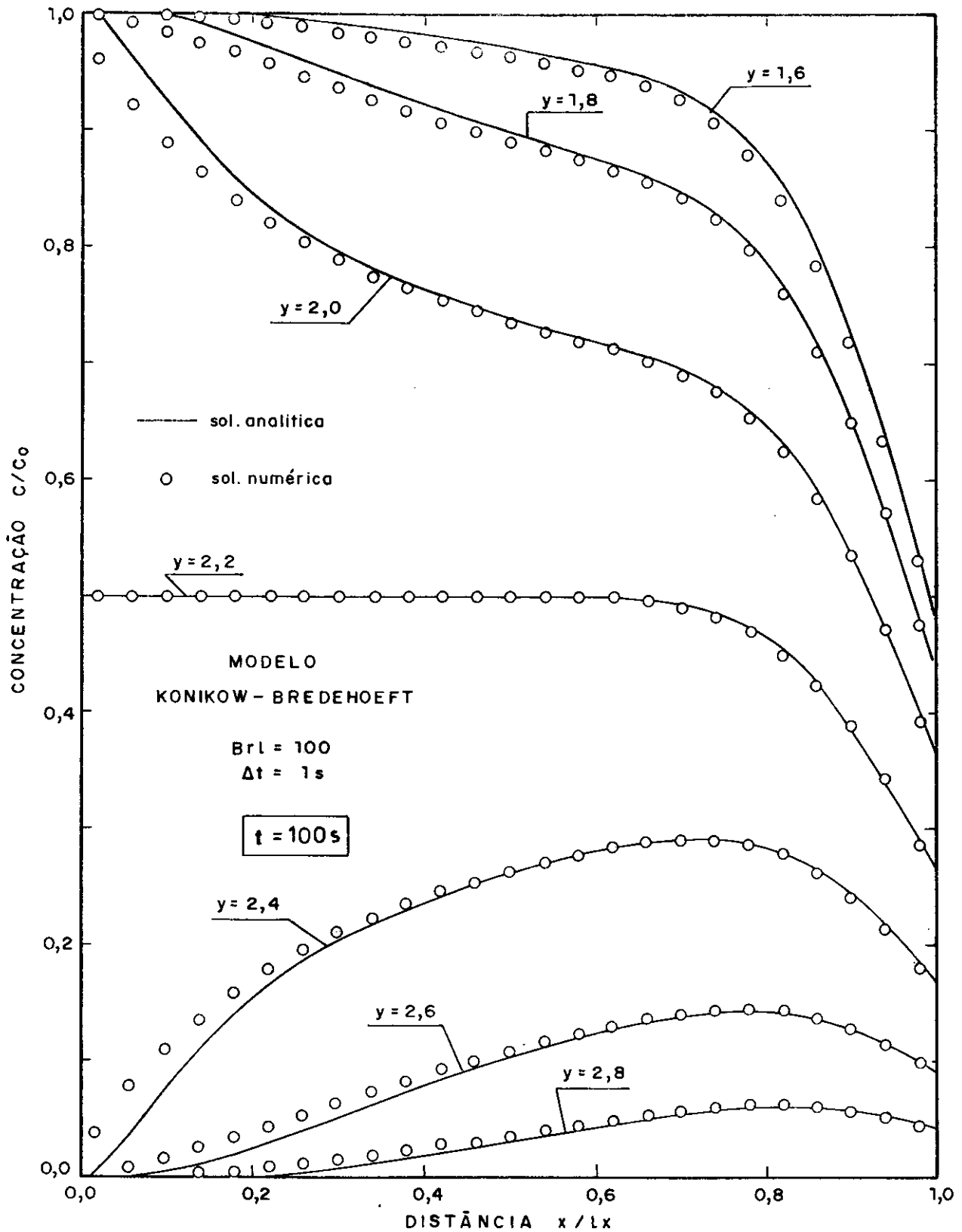


GRÁFICO IV-3 : Verificação bidimensional do modelo de Konikow - Bredehoeft para os dados da figura III-6

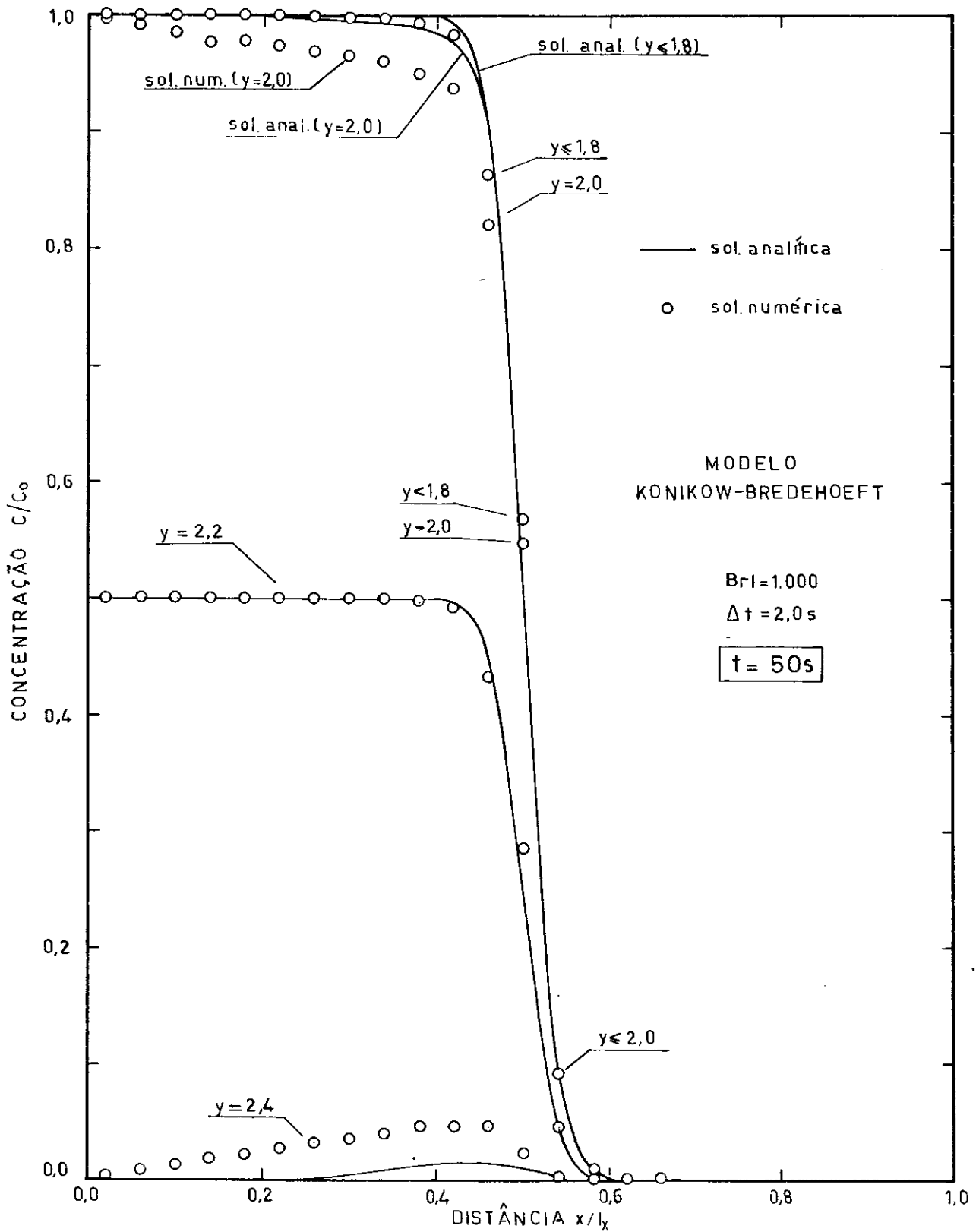


GRÁFICO IV-4 Verificação bidimensional do modelo de Konikow Bredehoeft para os dados da figura III-6 ($D_L=0.001$ e $D_T=0.0001\text{cm}^2/\text{s}$).

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A poluição de águas subterrâneas pode ser modelada por um conjunto de equações matemáticas, o qual Fried (1975) denominou esquema de dispersão.

Devido a condições de contorno complexas, não é possível obter soluções analíticas para o esquema de dispersão, sendo necessário recorrer-se a métodos numéricos.

A equação de transporte de massa, em particular, apresenta problemas de oscilação e de dispersão numérica, quando resolvida numericamente. Vários métodos têm sido desenvolvidos com o intuito de se eliminar esses problemas. Nesse estudo, foram analisados os métodos, baseados em diferenças finitas, propostos por: Peaceman e Rachford (1962), Stone-Brian (1963), Gardner et alii (1964 - M. Características), Price et alii (1968), Chaudhari (1970) e Laumbach (1975). A partir das comparações uni e bidimensionais, pode-se estabelecer as seguintes conclusões:

- (1) a análise dos resultados obtidos para o caso bidimensional, mostra que comparações ou verificações de acurácia feitas para o estado estacionário podem não ser conclusivas.

- (2) Os métodos de Peaceman e Rachford e de Stone-Brian-Price mostraram-se inadequados para tratar a equação de transporte de massa devido ao tempo de processamento consumido.
- (3) O método de Laumbach, no caso unidimensional, apresentou os melhores resultados para $0,90 \leq R \leq 0,95$. O valor de $R = \Delta T / \Delta X$ tende a se aproximar de 1,0 quando o número de Brenner aumenta. A extensão bidimensional desse método não forneceu bons resultados, apresentando oscilações e elevado tempo de processamento.
- (4) O método de Chaudhari apresenta um Δt ótimo, para o qual os desvios são mínimos. No caso unidimensional, os resultados obtidos para Δt_0 são muito bons, principalmente para números de Brenner baixos ($Br = 100$). No caso bidimensional, entretanto, fornece bons resultados apenas para números de Brenner baixos (desde que se determine o Δt_0 por tentativas). Para números de Brenner maiores ($Br > 1000$), esse método apresenta oscilações que se acentuam à medida que o número de Brenner aumenta.
- (5) A análise unidimensional do método das Características mostra que os melhores resultados são obtidos quando o ponto de 50% de concentração ($C = c/c_0$) cai exatamente no ponto onde é calculada a solução numérica, num dado tempo t . O desempenho desse método

do melhora à medida que o número de Brenner aumenta. Para o caso bidimensional, esse método forneceu resultados relativamente acurados, confirmando as conclusões obtidas no caso unidimensional.

- (6) Recomenda-se o método das características para tratar a equação de transporte de massa, mesmo nos casos onde este transporte é acentuadamente dispersivo.
- (7) A análise bidimensional mostrou que todos os métodos apresentaram dispersão numérica transversal nos trechos de elevado gradiente transversal de concentração.

Com base nessas conclusões foi selecionado, para descrever a poluição em águas subterrâneas, o modelo matemático desenvolvido por Konikow e Bredehoeft (1978). As verificações feitas para um caso unidimensional e outro bidimensional, onde se conhecem soluções analíticas, mostram que o modelo simula adequadamente tanto a equação de fluxo, quanto a equação de transporte de massa. Recomenda-se, entretanto, verificar o desempenho do modelo frente a dados reais obtidos de experiências controladas, no campo ou no laboratório, antes de se passar a aplicá-lo em casos de poluição de águas subterrâneas.

Recomenda-se, também, proceder a um estudo mais detalhado do problema de dispersão numérica transversal, observado durante as verificações do modelo, de modo a se melhorar a eficiência do modelo.

BIBLIOGRAFIA

- BEAR, J., 1972 - "Dynamics of fluids in porous media". Am. Elsevier Publishing Co., New York, 764 pp.
- BEAR, J., 1979 - "Hydraulics of groundwater". McGraw-Hill, Inc., Israel, 567 pp.
- BREDEHOEFT, J.D. e PINDER, G.F., 1973 - "Mass transport in flowing groundwater". Water. Resour. Res. Vol. 9(1), pp. 194-210.
- BRENNER, H., 1962 - "The diffusion model of longitudinal mixing in beds of finite length. Numerical values". Chem. Eng. Sci. n° 17, pp. 229-243.
- BRUCH, J.C. e STREET, R.L., 1967 - "Two-dimensional dispersion". J. Sanit. Div., ASCE, SA6, pp. 17-39.
- CHAUDHARI, N.M., 1971 - "An improved numerical technique for solving multidimensional displacement". Soc. Pet. Eng. J. Vol. 11(3), pp. 277-284.
- COOPER, . ., (1966) - "The equations of groundwater flow in fixed and deforming coordinates". J. Geophys. Res., n° 71(20), pp. 4785-4790.

- FRIED, J.J., 1975 - "Groundwater pollution". Elsevier Scientific Publishing Co., Amsterdam, 330 pp.
- GARDNER, A.O. Jr.; PEACEMAN, D.W. e POZZI, A.L. Jr., 1964 - "Numerical calculation of multidimensional miscible displacement by the method of characteristic". Soc. Pet. Eng. J., Vol. 4(1), pp. 26-36.
- HARLEMAN, D.R.F.; MEHLHORN, P.F. e RUMER, R.R. Jr., 1963 - "Dispersion-permeability correlation in porous media". J. Hydr. Div., ASCE, Vol. 89, HY4, pp. 67-85.
- HARLEMAN, D.R.F. e RUMER, R.R. Jr., 1963 - "Longitudinal and lateral dispersion in an isotropic porous medium". J. Fluid. Mech., Vol. 16(3), pp. 385-394.
- JACOB, C.E., 1950 - "Flow of groundwater", in H. Rouse (ed.), Engineering Hydraulics, John Wiley & Sons, New York, pp. 321-386.
- KLOTZ, D.; SEILER, K.P.; MOSER, H. e NEUMAIER, F., 1979 - "Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments". J. Hydrology, Vol. 45, pp. 169-184.
- KONIKOW, L.F., 1977 - "Modeling chloride movement in the alluvial aquifer at the Rocky Mountain Arsenal, Colorado, U.S. Geol. Survey Water Supply Paper 2044, 43 pp.

- KONIKOW, L.F. e BREDEHOEFT, J.D., 1974 - "Modeling flow and chemical quality changes in an irrigated stream aquifer system". Water Resour. Res., Vol. 10(3), pp. 546-562.
- KONIKOW, L.F. e BREDEHOEFT, J.D., 1978 - "Computer Model of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater". U.S. Geol. Survey Techniques of Water-Resources Investigations, Book 7, Chapter C2, 90 pp.
- KONIKOW, L.F. e GROVE, B.D., 1977 - "Derivation of equations describing solute transport in groundwater". U.S. Geol. Survey Water-Resources Investigations, n° 77-19, 30 pp.
- KÜPPER, J.A. e GUERRERO, P., 1982 - "Desenvolvimento de um modelo de dispersão de contaminantes em aquíferos. Relatório n° 1: Comparação de soluções numéricas para o caso unidimensional". COPPE/UFRJ, para a CNEN, 80 pp.
- LAMBERT, F., 1977 - "Simulations numeriques de Transferts de Solute en milieux poreux homogenes et heterogenes". Ph.D. Tese, Univ. des Sciences et Techniques du Languedoc, 120 pp.
- LANTZ, R.B., 1971 - "Quantitative evaluation of numerical diffusion (truncation error)". Soc. Pet. Eng. J., Vol. 11(3), pp. 315-320.

- LAUMBACH, D.D., 1975 - "A high accuracy finite-difference technique for treating the convection-diffusion equation". Soc. Petrol. Eng. J. Vol.15(4), pp. 517-531.
- OGATA, A. e BANKS, R.B., 1961 - "A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media". U.S. Geol. Survey, Washington D.C., Prof. Paper 411-A.
- PEACEMAN, D.W. e RACHFORD, H.H., 1962 - "Numerical calculation of multidimensional miscible displacement". Soc. Pet. Eng. J. Vol. 2(4), pp. 327-339.
- PINDER, G.F. e BREDEHOEFT, J.D., 1968 - "Application of the digital computer for aquifer evaluation". Water Resour. Res. Vol. 4(5), pp. 1069-1093.
- PRICE, H.S.; CAVENDISH, J.C. e VARGA, R.S., 1968 - "Numerical methods of higher-order accuracy for diffusion-convection equations". Soc. Pet. Eng. J. Vol. 8(3), pp. 293-303.
- PRICKETT, T.A. e LONNQUIST, C.G., 1971 - "Selected digital computer techniques for groundwater resource evaluation". Illinois Water Survey Bull. 55, 62 pp.
- REDDELL, D.L. e SUNADA, D.K., 1970 - "Numerical simulation of dispersion in groundwater aquifers". Colorado State Univ., Hydrology Paper nº 41, 79 pp.

- REMSON, I.; HORNBERGER, G.M. e MOLTZ, F.J., 1971 - "Numerical methods in subsurface hydrology". Wiley-Interscience, New York, 389 pp.
- ROBERTSON, J.B., 1974 - "Digital modeling of radioactive and chemical waste transport in the Snake River Plain aquifer at the National Reactor Testing Station, Idaho". U.S. Geol. Survey Open - File Rept. IDO-22054, 41 pp.
- RUMER, R.R. Jr., 1962 - "Longitudinal Dispersion in steady and unsteady flow". J. Hydraul. Div., ASCE, Vol. 88(4), HY4, pp. 147-172.
- SHAMIR, U.Y. e HARLEMAN, D.R.F., 1967 - "Numerical solution for dispersion in porous media". Water. Res. Research Vol. 5(2), pp. 557-581.
- SCHEIDEGGER, A.E., 1961 - "General theory of dispersion in porous media". J. Geophys. Research, Vol. 66(10), pp. 3273-3278.
- STONE, H.L. e BRIAN, P.L.T., 1963 - "Numerical solution of convective transport problems". A.I.Ch.E. J., Vol. 9(5), pp. 681-688.

- THURNAU, D.H., 1963 - "Algorithm 195, Bandsolve". Comm. Assoc. Comp. Mach., Vol. 6(8), pp. 441.
- TRESCOTT, P.C.; PINDER, G.F. e LARSON, S.P., 1976 - "Finite-difference model for aquifer simulation in two dimensions with results of numerical experiments". U.S. Geol. Survey Techniques of Water Resources Investigations, Book 7, Chapter C1, 116 pp.
- VAN GENUCHTEN, M. Ph., 1976 - "On the accuracy and efficiency of several numerical schemes for solving the convective-dispersion equation". Inter. Conf. on Finite Element in Water Resources, Princeton University, Princeton, N.J..
- VON ROSENBERG, D.U., 1969 - "Methods for the numerical solution of partial differential equations". Am. Elsevier Publishing Co., New York, 128 pp.

APÊNDICE A

EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS FINITAS OBTIDAS PARA A
EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA UNIDIMENSIONAL

Os métodos de Chaudhari e das Características são explícitos, ao passo que todos os outros (item III.2.2) são implícitos, fazendo uso da aproximação de Crank-Nicolson para avaliar as derivadas espaciais. No caso implícito as equações discretizadas geram um sistema tridiagonal que é resolvido pelo algoritmo de Gauss (Fried, 1975, pg. 240). Apresenta-se, a seguir, as diferentes formas de discretização da equação de transporte de massa unidimensional (equação (II-8)), de acordo com os métodos apresentados no item III-2.2. A notação C_i^n significa: concentração C no ponto i e no tempo n .

1. MÉTODOS EXPLÍCITOS

1.1 Método das Características

Um conjunto de pontos móveis, com densidade de P pontos por intervalo, é colocado ao longo da coluna discretizada, com as seguintes condições iniciais:

$$x_p^{n=0} = \frac{\Delta X}{P} \left(p - \frac{1}{2} - NP \right), \quad p = 1, 2, 3, \dots, 2NP$$

$N = \text{número de intervalos}$

$$\left. \begin{array}{ll} C_P^{n=0} = 1 & \text{se } X_P^{n=0} < 0 \\ C_P^{n=0} = 0 & \text{se } X_P^{n=0} > 0 \end{array} \right\} \quad (A-1)$$

Procedimento

a. os pontos móveis são movimentados, sendo suas novas posições dadas por:

$$X_P^{n+1} = X_P^n + \Delta T / \Delta X \quad (A-2)$$

b. calcula-se a concentração média, C_i^{n+1} , dos pontos móveis dentro de cada elemento, a qual é atribuída a esse elemento. O ponto móvel pertence ao elemento i se $i-1 < X_P^{n+1} \leq i$.

c. calcula-se a variação de concentração devido à dispersão para cada elemento

$$\Delta C_i^{n+1} = \frac{T}{Br \Delta X^2} \left[C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n \right] \quad (A-3)$$

d. calcula-se as novas concentrações dos pontos móveis

$$C_P^{n+1} = C_P^n + \Delta C_i^{n+1}, \quad i-1 < X_P^{n+1} \leq i \quad (A-4)$$

e. calcular a concentração C_i^{n+1} no nó de cada elemento para o novo intervalo de tempo

$$C_i^{n+1} = C_i^{n+1} + \Delta C_i^{n+1} \quad (A-5)$$

f. repete-se o procedimento para o próximo ΔT .

1.2 Método de Chaudhari

$$C_i^{n+1} = \left[\frac{\Delta T}{Br^* \Delta X^2} + \frac{\Delta T}{\Delta X} \right] C_{i-1}^n + \left[1 - \frac{2\Delta T}{Br^* \Delta X^2} - \frac{\Delta T}{\Delta X} \right] C_i^n + \left[\frac{\Delta T}{Br^* \Delta X^2} \right] C_{i+1}^n \quad (A-6)$$

onde

$$Br^* = \frac{2}{(2/Br) + \Delta T - \Delta X} \quad (A-7)$$

2. MÉTODOS IMPLÍCITOS

A equação discretizada para os métodos implícitos pode ser posta sob a forma:

$$A_1 C_{i-1}^{n+1} + A_2 C_i^{n+1} + A_3 C_{i+1}^{n+1} = B_1 C_{i-1}^n + B_2 C_i^n + B_3 C_{i+1}^n \quad (A-8)$$

onde os coeficientes são dados por:

2.1 Esquema de Diferenças Espaciais Centradas

$$A_1 = \frac{-\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$B_1 = -A_1$$

$$A_2 = 1 + \frac{\Delta T}{Br\Delta X^2}$$

$$B_2 = 1 - \frac{\Delta T}{Br\Delta X^2}$$

$$A_3 = \frac{-\Delta T}{2Br\Delta X^2} + \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$B_3 = -A_3$$

2.2 Esquema de Diferenças Espaciais Regressivas

$$A_1 = \frac{-\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{\Delta T}{2\Delta X}$$

$$B_1 = -A_1$$

$$A_2 = 1 + \frac{\Delta T}{2\Delta X} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2}$$

$$B_2 = 1 - \frac{\Delta T}{2\Delta X} - \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2}$$

$$A_3 = \frac{-\Delta T}{2Br\Delta X^2}$$

$$B_3 = -A_3$$

2.3 Método de Peaceman e Rachford

Peaceman e Rachford utilizam os coeficientes dados no item 2.2 no trecho à montante da frente de dispersão, para evitar oscilações. Os coeficientes dados no item 2.1 são utilizados no trecho da frente propriamente dita. O critério usado para definir qual dos dois conjuntos de coeficientes é utilizado

baseia-se na ocorrência ou não de excessos. Um excesso acontece se $C_i^n > C_{i-1}^n$. Neste caso marca-se o ponto i , no qual ocorreu excesso, e transfere-se o excesso de C_i^n sobre C_{i-1}^n ($\Delta C = C_i^n - C_{i-1}^n$) para C_{i+1}^n ($C_{i+1}^n = C_{i+1}^n + \Delta C$). Inicialmente utiliza-se os coeficientes dados no item 2.1 para todos os pontos e, a partir do momento em que um ponto é marcado, utiliza-se os coeficientes dados no item 2.2 para esses pontos.

2.4 Método de Stone-Brian-Price

$$A_1 = \frac{1}{6} - \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$B_1 = \frac{1}{6} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} + \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$A_2 = \frac{2}{3} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2}$$

$$B_2 = \frac{2}{3} - \frac{\Delta T}{Br\Delta X^2}$$

$$A_3 = \frac{1}{6} - \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} + \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$B_3 = \frac{1}{6} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

2.5 Método de Laumbach

$$A_1 = \frac{\omega}{2} - \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{T}{4\Delta X}$$

$$B_1 = \frac{\omega}{2} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} + \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$A_2 = (1-\omega) + \frac{\Delta T}{Br\Delta X^2}$$

$$B_2 = (1-\omega) - \frac{\Delta T}{Br\Delta X^2}$$

$$A_3 = \frac{\omega}{2} - \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} + \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

$$B_3 = \frac{\omega}{2} + \frac{\Delta T}{2Br\Delta X^2} - \frac{\Delta T}{4\Delta X}$$

onde

$$\omega = \frac{1}{3} + \frac{r^2}{6}$$

e

$$r = \frac{\Delta T}{\Delta X}$$

APÊNDICE B

EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS FINITAS OBTIDAS PARA A
EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA BIDIMENSIONAL
SIMPLIFICADA

Apresenta-se a seguir as equações de diferenças finitas para a equação (II-28) segundo os métodos de Chaudhari e Características (explícito) e de Laumbach e DCI/ADIP (implícito).

1. MÉTODOS EXPLÍCITOS

1.1 Método de Chaudhari

$$\begin{aligned}
 C_{i,j}^{n+1} = & \left[\frac{D_{xx}\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{2\Delta x} \left(1 + \frac{U\Delta t}{\Delta x} \right) \right] \cdot C_{i-1,j}^n + \\
 & + \left[\frac{D_{xx}\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{2\Delta x} \left(1 - \frac{U\Delta t}{\Delta x} \right) \right] \cdot C_{i+1,j}^n + \\
 & + \left[1 - \frac{2D_{xx}\Delta t}{\Delta x^2} - \frac{2D_{yy}\Delta t}{\Delta y^2} - \left(\frac{U\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \right] \cdot C_{i,j}^n + \\
 & + \left[\frac{D_{yy}\Delta t}{\Delta y^2} \right] \cdot (C_{i,j-1}^n + C_{i,j+1}^n)
 \end{aligned} \tag{B-0}$$

1.2 Método das Características

Um conjunto de pontos móveis, com densidade de P_x pontos na direção x e P_y pontos na direção y , é colocado sobre a malha de discretização com as seguintes condições iniciais:

$$\left. \begin{aligned} X_P^{n=0} &= \frac{\Delta x}{P_x} \left(k - \frac{1}{2} - P_x N_x \right) \\ Y_P^{n=0} &= \frac{\Delta y}{P_y} \left(p - (k-1) P_y N_y - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &(k-1)P_y N_y + 1 < p < kP_y N_y \\ &k = 1, 2, 3, 4, \dots, 2P_x N_x \end{aligned}$$

(B-1)

$$C_P^{n=0} = C_o \quad \text{se } X_P^{n=0} < 0 \quad \text{e} \quad Y_P^{n=0} < b - \Delta y/2$$

$$C_P^{n=0} = C_o/2 \quad \text{se } X_P < 0 \quad \text{e} \quad b - \frac{\Delta y}{2} < Y_P^{n=0} < b + \frac{\Delta y}{2}$$

$$C_P^{n=0} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{ll} \text{se } X_P < 0 & \text{e } Y_P^{n=0} > b + \frac{\Delta y}{2} \quad \text{ou} \\ \text{se } X_P > 0 & \end{array} \right.$$

(B-2)

onde:

N_x é o número de elementos na direção x ;

N_y é o número de elementos na direção y ; e

b e C_o são definidos na figura III-6.

Procedimento

- a. os pontos móveis são movimentados, sendo suas novas posições dadas por:

$$X_p^{n+1} = X_p^n + U\Delta t \quad (\text{B-3.a})$$

$$Y_p^{n+1} = Y_p^n \quad (\text{B-3.b})$$

- b. calcula-se a concentração média, $\bar{C}_{i,j}^{n+1}$, dos pontos móveis dentro de cada elemento, a qual é atribuída ao nó desse elemento. Um ponto móvel pertence ao elemento (i,j) se $i-1 < (X_p^{n+1}/\Delta x) < i$ e $j-1 < (Y_p^{n+1}/\Delta y) < j$.

- c. calcula-se a variação de concentração devido à dispersão para cada elemento:

$$\Delta C_{i,j}^{n+1} = \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \left[\bar{C}_{i-1,j}^{n+1} - 2\bar{C}_{i,j}^{n+1} + \bar{C}_{i+1,j}^{n+1} \right] + \frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2} \left[\bar{C}_{i,j-1}^{n+1} - 2\bar{C}_{i,j}^{n+1} + \bar{C}_{i,j+1}^{n+1} \right] \quad (\text{B-4})$$

- d. calcula-se as novas concentrações dos pontos móveis:

$$C_p^{n+1} = C_p^n + \Delta C_{i,j}^{n+1} \quad , \quad i-1 < X_p^{n+1}/\Delta x < i \quad (\text{B-5})$$

$$j-1 < Y_p^{n+1}/\Delta y < j$$

e. calcular a concentração $C_{i,j}^{n+1}$ no nó de cada elemento para o novo intervalo de tempo:

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^{n+1/2} + \Delta C_{i,j}^{n+1} \quad (\text{B-6})$$

f. repete-se o procedimento para o próximo Δt .

2. MÉTODOS IMPLÍCITOS

2.1 DCI/ADIP

1º sub-intervalo de tempo

$$\begin{aligned} & \left[\frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{U \Delta t}{4\Delta x} \right] C_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[-1 - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right] C_{i,j}^{n+1/2} + \\ & + \left[\frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{U \Delta t}{4\Delta x} \right] \cdot C_{i+1,j}^{n+1/2} = \\ & = \left[-\frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2} \right] \cdot C_{i,j-1}^n + \left[-1 + \frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2} \right] C_{i,j}^n + \\ & + \left[-\frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2} \right] C_{i,j+1}^n \end{aligned} \quad (\text{B-7})$$

2º sub-intervalo de tempo

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{D_L \Delta t}{2\Delta y^2} \right] C_{i,j-1}^{n+1} + \left[-1 - \frac{D_L \Delta t}{\Delta y^2} \right] C_{i,j}^{n+1} + \\
 & + \left[\frac{D_L \Delta t}{2\Delta y^2} \right] \cdot C_{i,j+1}^{n+1} = \\
 & = \left[\frac{-D_L \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{4\Delta x} \right] \cdot C_{i-1,j}^{n+1/2} + \left[-1 + \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right] C_{i,j}^{n+1/2} + \\
 & + \left[\frac{-D_L \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{4\Delta x} \right] \cdot C_{i,j+1}^{n+1/2} \quad (B-8)
 \end{aligned}$$

2.2 Laumbach

a. Resolução por Gauss

A equação discretizada obtida por Laumbach pode ser posta sob a forma:

$$\begin{aligned}
 & A_1 C_{i,j-1}^{n+1} + A_2 C_{i-1,j}^{n+1} + A_3 C_{i,j}^{n+1} + A_4 C_{i+1,j}^{n+1} + A_5 C_{i,j+1}^{n+1} = \\
 & = B_1 C_{i,j-1}^n + B_2 C_{i-1,j}^n + B_3 C_{i,j}^n + B_4 C_{i+1,j}^n + B_5 C_{i,j+1}^n \quad (B-9)
 \end{aligned}$$

onde:

$$A_1 = \frac{\omega_2}{2} - \frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2}$$

$$B_1 = \frac{\omega_2}{2} + \frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2}$$

$$A_2 = \frac{\omega_1}{2} - \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{4\Delta x}$$

$$B_2 = \frac{\omega_1}{2} + \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{4\Delta x}$$

$$A_3 = 1 - \omega_1 - \omega_2 + \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2}$$

$$B_3 = 1 - \omega_1 - \omega_2 - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2}$$

$$A_4 = \frac{\omega_1}{2} - \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{4\Delta x}$$

$$B_4 = \frac{\omega_1}{2} + \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{4\Delta x}$$

$$A_5 = \frac{\omega_2}{2} - \frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2}$$

$$B_5 = \frac{\omega_2}{2} + \frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2}$$

(B-10)

b. Solução por ADIP

1º sub-intervalo de tempo

$$A_1 C_{i-1,j}^{n+1/2} + A_2 C_{i,j}^{n+1/2} + A_3 C_{i+1,j}^{n+1/2} =$$

$$= B_1 C_{i,j-1}^n + B_2 C_{i-1,j}^n + B_3 C_{i,j}^n + B_4 C_{i+1,j}^n + B_5 C_{i,j+1}^n$$

(B-11)

onde :

$$A_1 = \frac{\omega_1}{2} - \frac{D_L \Delta t}{4\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{8\Delta x}$$

$$B_1 = \frac{D_T \Delta t}{2\Delta y^2} = B_5$$

$$A_2 = 1 - \omega_1 + \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2}$$

$$B_2 = \frac{\omega_1}{2} + \frac{D_L \Delta t}{4\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{8\Delta x}$$

$$A_3 = \frac{\omega_1}{2} - \frac{D_L \Delta t}{4\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{8\Delta x}$$

$$B_3 = 1 - \omega_1 - \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{D_T \Delta t}{\Delta y^2}$$

$$B_4 = \frac{\omega_1}{2} + \frac{D_L \Delta t}{4\Delta x^2} - \frac{U\Delta t}{8\Delta x}$$

2º sub-intervalo de tempo

$$A_1^* C_{i,j-1}^{n+1} + A_2^* C_{i,j}^{n+1} + A_3^* C_{i,j+1}^{n+1} =$$

$$= B_1^* C_{i,j-1}^{n+1/2} + B_2^* C_{i-1,j}^{n+1/2} + B_3^* C_{i,j}^{n+1/2} + B_4^* C_{i+1,j}^{n+1/2} + B_5^* C_{i,j+1}^{n+1/2}$$

(B-12)

onde :

$$A_1^* = \frac{\omega_2}{2} - \frac{D_T \Delta t}{4\Delta y^2}$$

$$B_1^* = \frac{\omega_2}{2} + \frac{D_T \Delta t}{4\Delta y^2} = B_5^*$$

$$A_2^* = 1 - \omega_2 + \frac{D_T \Delta t}{4\Delta y^2}$$

$$B_2^* = \frac{D_L \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{U\Delta t}{4\Delta x}$$

$$A_3^* = \frac{\omega_2}{2} - \frac{D_T \Delta t}{4 \Delta y^2}$$

$$B_3^* = 1 - \omega_2 - \frac{D_T \Delta t}{2 \Delta y^2} - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2}$$

$$B_4^* = \frac{D_L \Delta t}{2 \Delta x^2} - \frac{U \Delta t}{4 \Delta x}$$

sendo $\omega_1 = \frac{1}{3} + \frac{r_1^2}{6}$

$$r_1 = \frac{U \Delta t}{2 \Delta x}$$

$$\omega_2 = \frac{1}{3} + \frac{r_2^2}{6}$$

$$r_2 = 0$$

APÊNDICE C

DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFERENÇAS FINITAS PARA O
TERMO DISPERSIVO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE
MASSA

Da equação (IV-14) temos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[bD_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] &= \frac{\partial}{\partial x} \left[bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left[bD_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + bD_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (C-1)$$

A aproximação de diferenças finitas para a derivada na direção x, no ponto (i,j), pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} &\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]_{i,j} = \\ &= \frac{(bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x})_{i+1/2,j} - (bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x})_{i-1/2,j}}{\Delta x} + \\ &= \frac{(bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y})_{i+1/2,j} - (bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y})_{i-1/2,j}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (C-2)$$

As derivadas espaciais da concentração no ponto $(i+1/2, j)$ podem ser aproximadas por:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+1/2, j} = \frac{C_{i+1, j} - C_{i, j}}{\Delta x} \quad (C-3)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)_{i+1/2, j} = \frac{C_{i+1/2, j+1} - C_{i+1/2, j-1}}{2\Delta y} \quad (C-4)$$

Como as concentrações são definidas somente nos nós, é preciso expressar a equação (C-4) somente em função das concentrações nodais. Assumindo que a concentração na fronteira entre duas células é aproximadamente igual à medida aritmética entre as concentrações dos nós das células adjacentes, temos:

$$C_{i+1/2, j+1} = \frac{C_{i, j+1} + C_{i+1, j+1}}{2} \quad (C-5)$$

$$C_{i+1/2, j-1} = \frac{C_{i, j-1} + C_{i+1, j-1}}{2} \quad (C-6)$$

Substituindo as equações (C-5) e (C-6) na equação (C-4), obtém-se:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)_{i+1/2, j} = \frac{C_{i, j+1} + C_{i+1, j+1} - C_{i, j-1} - C_{i+1, j-1}}{4\Delta y} \quad (C-7)$$

De modo análogo obtém-se as discretizações para derivadas espaciais da concentração no ponto $(i-1/2, j)$:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-1/2,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{\Delta x} \quad (C-8)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)_{i-1/2,j} = \frac{C_{i-1,j+1} + C_{i,j+1} - C_{i-1,j-1} - C_{i,j-1}}{4\Delta y} \quad (C-9)$$

Substituindo-se as equações (C-3), (C-7), (C-8) e (C-9) na equação (C-2), obtêm-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[bD_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + bD_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] = \\ = \frac{(bD_{xx})_{i+1/2,j} (C_{i+1,j} - C_{i,j}) - (bD_{xx})_{i-1/2,j} (C_{i,j} - C_{i-1,j})}{(\Delta x)^2} + \\ + \frac{(bD_{xy})_{i+1/2,j} (C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1} - C_{i,j-1} - C_{i+1,j-1})}{4\Delta x \Delta y} - \\ - \frac{(bD_{xy})_{i-1/2,j} (C_{i-1,j+1} + C_{i,j+1} - C_{i-1,j-1} - C_{i,j-1})}{4\Delta x \Delta y} \end{aligned} \quad (C-10)$$

De modo semelhante pode-se deduzir a equação de diferenças finitas para a derivada na direção y, ou seja:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[b^D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + b^D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] =$$

$$\frac{(b^D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y})_{i,j+1/2} - (b^D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y})_{i,j-1/2}}{\Delta y} +$$

$$+ \frac{(b^D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x})_{i,j+1/2} - (b^D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x})_{i,j-1/2}}{\Delta y} =$$

$$= \frac{(b^D_{yy})_{i,j+1/2} (C_{i,j+1} - C_{i,j}) - (b^D_{yy})_{i,j-1/2} (C_{i,j} - C_{i,j-1})}{(\Delta y)^2} +$$

$$+ \frac{(b^D_{yx})_{i,j+1/2} (C_{i+1,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j} - C_{i-1,j+1})}{4\Delta x \Delta y} -$$

$$- \frac{(b^D_{yx})_{i,j-1/2} (C_{i+1,j-1} + C_{i+1,j} - C_{i-1,j-1} - C_{i-1,j})}{4\Delta x \Delta y}$$

(C-11)

APÊNDICE D

DADOS PARA OPERAÇÃO DO MODELO

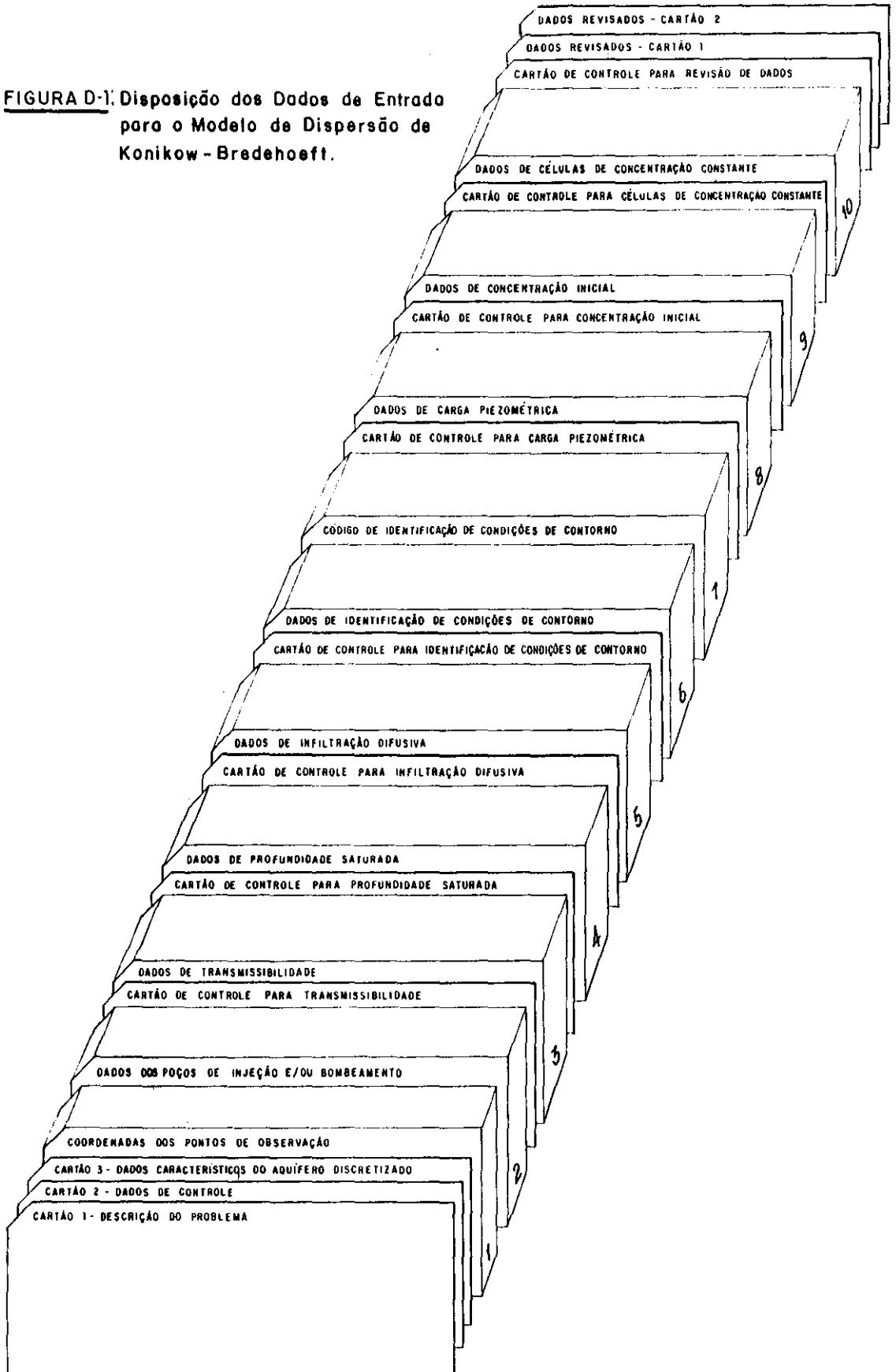
Este modelo é relativamente fácil de ser operado. Ele é dimensionalmente coerente, de modo que é possível operá-lo com dados cujas unidades estejam no sistema MKS ou CGS ou mesmo ou outro sistema de unidades, com a única restrição que a unidade de tempo deve ser o segundo.

Devido à sistemática interna de cálculo, o modelo exige que a área de interesse seja circundada por células de fronteira, através das quais não há fluxo. Isto é feito impondo-se transmissibilidade nula nestas células.

O esquema geral de entrada de dados é apresentado na figura D-1. Para cada parâmetro, que pode apresentar variações espaciais, é usado um cartão de controle, cuja finalidade é especificar se o parâmetro é constante ou variável ao longo do aquífero. Este cartão apresenta duas variáveis: INPUT e FCTR. Se INPUT = 0 o parâmetro em questão é constante e seu valor é dado por FCTR. Se INPUT = 1 o parâmetro, definido em cada nó, é lido para todo o aquífero e FCTR passa a ser somente um fator de multiplicação para os valores lidos.

Apresenta-se a seguir, sob a forma de tabela, uma pequena descrição dos dados de entrada.

FIGURA D-1. Disposição dos Dados de Entrada para o Modelo de Dispersão de Konikow - Bredehoeft.



CARTÃO	COLUNA	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
1	1-80	10A8	TITLE	Descrição do problema

2	1-4	I4	NTIM	Número máximo de intervalos de tempo num período de bombeamento (limite = 100)
	5-8	I4	NPMP	Número de períodos de bombeamento. Se NPMP > 1, conjunto de dados 11 deve ser completado
	9-12	I4	NX	Número de nós na direção x (Limite = 50)
	13-16	I4	NY	Número de nós na direção y (Limite = 50)
	17-20	I4	NPMAX	Número máximo de pontos móveis (Limite = 6.400)
	21-24	I4	NPNT	Intervalo de tempo para a impressão de dados hidráulicos e químicos.
	25-28	I4	NITP	Número de parâmetros de iteração para modelo de fluxo (em geral $4 \leq \text{NITP} \leq 7$)
	29-32	I4	NUMOBS	Número de pontos de observação
	33-36	I4	ITMAX	Número máximo de iterações em ADIP (em geral $100 \leq \text{ITMAX} \leq 200$)
	37-40	I4	NREC	Número de poços de bombeamento ou de retirada
	41-44	I4	NPTPND	Número inicial de pontos móveis por célula (4, 5, 8 ou 9)

CARTÃO	COLUNA	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
2	45-48	I4	NCODES	Número de códigos de identificação do tipo de condições, de contorno (Limite = 10)
	49-52	I4	NPNTMV	Número de movimentos dos pontos móveis para <u>im</u> primir resultados de <u>con</u> centração (especifique 0 para imprimir só ao fim de cada intervalo de tempo)
	53-56	I4	NPNTVL	Opção para imprimir <u>velo</u> cidades calculadas (0 = não imprime; 1 = imprime só no primeiro intervalo de tempo; 2 = imprime <u>pa</u> ra todos intervalos de tempo)
	57-60	I4	NPNTD	Opção para impressão dos coeficientes de <u>disper</u> são calculados (critério idêntico a NPNTVL)
	61-64	I4	NPDELC	Opção para imprimir as variações calculadas da concentração (0 = não <u>im</u> prime; 1 = imprime)
	65-68	I4	NPNCHV	Opção para perfurar dados de velocidade nos nós (critério idêntico a NPNTVL). Unidade de <u>per</u> furação = 7
	69-72	I4	ITEMPO	Opção para unidades de tempo (0 = ano; 1=sec)
	73-76	I4	IPERM	Opção para definir fluxo permanente (0=transiente; 1=permanente)

CARTÃO	COLUNA	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
2	77-80	I4	NCNBDY	Número de células de fronteira com concentração constante

3	1-10	G10.0	PINT	Período de bombeamento (se ITEMPO =0, ano; se ITEMPO = 1, sec)
	11-15	G5.0	TOL	Critério de convergência em ADIP (geralmente $TOL \leq 0.01$)
	16-20	G5.0	POROS	Porosidade efetiva
	21-25	G5.0	BETA	Dispersividade longitudinal (α_L)
	26-30	G5.0	S	Coefficiente de armazenamento (S=0 para problemas de fluxo permanente)
	31-35	G5.0	TIMX	Multiplicador do intervalo de tempo (TIMX é desprezado se S=0)
	36-40	G5.0	TINIT	Intervalo de tempo inicial (TINIT é desprezado se S=0)
	41-45	G5.0	XDEL	Incremento espacial na direção x
	46-50	G5.0	YDEL	Incremento espacial na direção y
	51-55	G5.0	DLTRAT	Relação entre as dispersividades transversal e longitudinal
	56-60	G5.0	CELDIS	Máxima distância relativa para movimento dos pontos móveis ($0 \leq CELDIS < 1.0$)
	61-65	G5.0	ANFCTR	Relação entre as transmissibilidades principais T_{yy} para T_{xx})

CONJUNTO DE DADOS	NÚMERO DE CARTÕES	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
1	Valor de NUMOBS	2I2	IXOBS, IYOBS	Coordenadas x e y dos pontos de observação. Se NUMOBS = 0 este conjunto é eliminado
2	Valor de NREC	2I2 2G8.2	IX, IY, REC, CNRECH	Coordenadas x e y dos poços de bombeamento (+) ou injeção (-), vazão e concentração da água injetada, Se NREC=0 este conjunto é eliminado
3a.	1	I1, G10.0	INPUT, FCTR	Cartão de controle para transmissibilidade
b.	Valor de NY	20 G4.1	VPRM	Matriz de armazenamento temporário de dados de transmissibilidade. Para um aquífero anisotrópico, deve-se ler os valores de T_{xx} e o programa ajustará automaticamente T_{yy} através de ANFCTR
4a.	1	I1,G10.0	INPUT FCTR	Cartão de controle para THCK
b.	Valor de NY	20 G3.0	THCK	Profundidade saturada do aquífero

CONJUNTO DE DADOS	NÚMERO DE CARTÕES	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
5a.	1	I1,G10.0	INPUT,FCTR	Cartão de controle para RECH
b.	Valor de NY	20 G4.1	RECH	Infiltração difusiva. Recarga (-) ou perda (+)
6a.	1	I1,G10.0	INPUT,FCTR	Cartão de controle para NODEID
b.	Valor de NY	80 I1	NODEID	Matriz de identificação das condições de contorno (p.ex. carga constante)
7	Valor de NCODES	I2,3G10.2	ICODE, FCTR1, FCTR2, FCTR3, OVERRD	Instruções para uso da matriz NODEID. Quando NODEID=ICODE o programa faz infiltração localizada = FCTR1, CNREC = FCTR2 e se OVERRD ≠ 0, RECH = FCTR3. Faça OVERRD = 0 para preservar os valores de RECH especificado no conjunto 5.
8a.	1	I1,G10.0	INPUT, FCTR	Cartão de controle para WT
b.	Valor de NY	20 G4.0	WT	Carga piezométrica inicial.
9a.	1	I1,G10.0	INPUT, FCTR	Cartão de controle para CONC
b.	Valor de NY	20 G4.0	CONC	Concentração inicial no aquífero

CONJUNTO DE DADOS	NÚMERO DE CARTÕES	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
10a.	1	I1	INPUT	Cartão de controle para célula de <u>con</u> centração constante
b.	Valor de NCNBDY	20 G4.0	IX,IY	Coordenadas das células cuja <u>con</u> centração é constante ao longo dos <u>cálcu</u> los.
11	Este conjunto de dados permite que os parâmetros de tempo, opções de impressão e dados de bombeamento sejam revisados para cada período de bombeamento simulado. O conjunto 11 só é usado se NPMP > 1. A sequência de cartões no conjunto 11 deve ser repetida (NPMP-1) vezes, ou seja, ele é necessário a cada novo período de bombeamento.			
11a.	1	I1	ICLK	Parâmetro para verificar se revisões são desejadas. Se ICLK=1, revisão deve ser feita e os dados 11b e 11c devem ser completados. Se ICLK=0 não se quer nenhuma revisão para o próximo período e os outros dados são desprezados.

CONJUNTO DE DADOS	NÚMERO DE CARTÕES	FORMATO	VARIÁVEL	DEFINIÇÃO
b.	1	10 I4, 3G5.0	NTIM, NPNT, NITP, ITMAX, NREC, NPNTMV, NPNTVL, NPNTD, NPDELC, NPNCHV, PINT, TIMX e TINIT	Treze parâmetros podem ser revisa- dos, para o próxi- mo período de bom- beamento. Somente inclua este car- tão se ICHK = 1.
c.	Valor de NREC	2I2 2G8.2	IX, IY, REC, CNRECH	Revisão do conjun- to 2 de dados. In- clua parte 11c, se ICHK=1 e NREC > 0 na parte 11b

Observação: Os limites especificados podem ser modificados, se necessário, bastando alterar as dimensões das matrizes correspondentes nas declarações COMMON.